

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Нижегородский
государственный университет им. Н.И. Лобачевского»**

На правах рукописи

ДЕГТЯРЕВ ВЛАДИМИР ЕВГЕНЬЕВИЧ

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ И СПИНОВЫХ ХАРАКТЕРИСТИК
КВАНТОВО-РАЗМЕРНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР РАЗЛИЧНОЙ
ГЕОМЕТРИИ НА ОСНОВЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВ $A^{III}B^V$**

Специальность 01.04.10 — Физика полупроводников

**Диссертация
на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук**

Научный руководитель:
кандидат физ.-мат. наук
Хазанова Софья Владиславовна

**г. Нижний Новгород,
2018 г.**

Оглавление

Введение	6
1 Литературный обзор	15
1.1 Введение	15
1.2 Квантово-размерные эффекты и характеристики	18
1.2.1 Энергетический спектр в низкоразмерных системах	18
1.2.2 Плотность состояний в низкоразмерных структурах	21
1.3 Методы изготовления квантово-размерных структур	23
1.3.1 Материалы, используемые для получения гетероструктур	23
1.3.2 Метод молекулярно-лучевой эпитаксии для получения гетероструктур .	26
1.3.3 Гетероструктуры с дельта-легированными слоями	27
1.3.4 Получение и методы исследования полупроводниковых нанопроволок .	28
1.4 Численное решение уравнений Шрёдингера и Пуассона	31
1.4.1 Изучение вольт-фарадных характеристик и профилей наблюдаемой концентрации носителей в гетероструктурах $A^{III}B^V$	32
1.5 Спин-орбитальное взаимодействие в структурах с размерным квантованием . . .	37
2 Моделирование оптических и вольт-фарадных характеристик гетероструктур $In_xGa_{1-x}As$ /GaAs, содержащих квантовые ямы и δ-легированные слои	42
2.1 Постановка задачи	42
2.2 Приближение эффективной массы для расчёта энергетического спектра квантовых ям	45
2.3 Численное решение задачи о спектре квантовых ям в приближении эффективной массы	47
2.3.1 Дискретизация уравнений Шрёдингера и Пуассона в координатном пространстве	47

2.3.2	Квантовая концентрация носителей в системах с одномерным квантовым ограничением	50
2.3.3	Итерационная процедура самосогласованного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона	51
2.3.4	Проблема нефизичных быстро осциллирующих состояний	53
2.3.5	Методика численного расчёта вольт-фарадной характеристики и профиля наблюдаемой концентрации	55
2.4	Оптимизация оптических и энергетических характеристик двойной туннельно-связанной квантовой ямы	56
2.4.1	Расчёт энергетического спектра в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs туннельно-связанных квантовых ям	56
2.4.2	Зависимость энергетического спектра от геометрических параметров гетероструктуры	59
2.5	Расчёт энергетического спектра и оптических характеристик структуры, состоящей из семи туннельно-связанных квантовых ям	61
2.6	Анализ структур с одиночными квантовыми ямами и δ -легированными слоями .	65
2.6.1	Вольт-фарадные характеристики и профили наблюдаемой концентрации одиночных $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs квантовых ям	65
2.6.2	Вольт-фарадные характеристики и профили наблюдаемой концентрации одиночных δ -легированных слоёв	66
2.6.3	Вольт-фарадные характеристики структур, содержащих InGaAs/GaAs квантовую яму и δ -слой	70
2.6.4	Влияние взаимного расположения δ -слоя и квантовой ямы на вольт-фарадные характеристики и профили наблюдаемой концентрации	73
2.7	Результаты и выводы по главе 2	77
3	Особенности образования электронного газа в полупроводниковых нанопроволоках и нанотрубках	78
3.1	Введение	78
3.1.1	Постановка задачи	79
3.1.2	Исследуемые структуры	80
3.2	Энергетический спектр квантовых нитей, нанопроволок и трубок в приближении эффективной массы	80
3.2.1	Пространственная дискретизация уравнения Шрёдингера для случая двумерного квантового ограничения	81

3.2.2	Дискретизация двумерного оператора кинетической энергии в магнитном поле	85
3.3	Решение двумерного дискретного уравнения Пуассона для полупроводниковых нанопроволок	86
3.4	Спектр и распределение носителей в нанопроволоках гексагонального и треугольного поперечного сечения	87
3.4.1	Модель исследуемых структур	87
3.4.2	Особенности энергетического спектра нанопроволок с симметричным потенциалом	88
3.5	Распределение концентрации в нанопроволоках с правильным гексагональным поперечным сечением	92
3.6	Локализация носителей вблизи рёбер нанопроволоки для гексагональной и треугольной форм поперечного сечения	100
3.7	Распределение носителей и влияние магнитного поля на энергетический спектр для гексагональных InAs нанотрубок	102
3.8	Распределение электронной плотности в треугольных нанопроволоках под влиянием внешнего электростатического напряжения	105
3.9	Результаты и выводы по главе 3	109
4	Расчёт спиновых характеристик гетероструктур $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs с одномерным квантовым ограничением	110
4.1	Введение	110
4.2	Постановка задачи	113
4.3	Метод расчёта в рамках 8-зонной модели Кейна	114
4.4	Методика численного моделирования спектра в рамках 8-зонной модели Кейна	116
4.4.1	Дискретизация гамильтониана Кейна при помощи метода конечных разностей	116
4.4.2	Ограничения схемы дискретизации: нефизичные быстро-осциллирующие состояния	118
4.5	Спиновое расщепление в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs и $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ /GaSb квантовых ямах	121
4.6	Определение параметров спин-орбитального взаимодействия	125
4.7	Параметр Дрессельхауза в симметричных квантовых ямах	127
4.8	Зависимость параметра Дрессельхауза от состава в симметричной квантовой яме	128
4.9	Режим устойчивого спинового хеликса в асимметричном потенциале, индуцированном поперечным электрическим полем	131

4.10 Результаты и выводы по главе 4	136
Заключение	137
Благодарности	139
Список сокращений и условных обозначений	140
Список публикаций по теме диссертационного исследования	142
Список литературы	146

Введение

Актуальность

Одним из основных направлений развития современной наноэлектроники является создание новых и совершенствование существующих полупроводниковых приборов, основанных на наногетероструктурах. Возможности современных методов технологий роста кристаллов (с точностью до нескольких монослоёв) позволяют осуществить переход к созданию структур пониженной размерности, в которых ярко выражены квантовые эффекты, например, появление дискретного энергетического спектра, туннелирование, спин-зависимые явления. Электроника на гетероструктурах находит широкое практическое применение в областях телекоммуникационной и вычислительной техники, в частности, для создания светодиодов, оптических модуляторов, резонансно-туннельных диодов, а также гетероструктурных биполярных транзисторов (НВТ), транзисторов с высокой подвижностью (НЕМТ), приборов спинтроники. НЕМТ-транзисторы являются основой большинства современных устройств СВЧ электроники.

Особенностью современного этапа развития наноэлектронных приборов является усложнение их конструкции для создания качественно новых систем связи с улучшенными характеристиками. Достижение необходимых параметров приборов возможно с помощью нескольких подходов, таких как введение дополнительного легирования, использование нанонитей и нанопроволок различной геометрии, управление спиновой степенью свободы.

Поскольку основные параметры транзисторов (предельная частота усиления, крутизна, шумовые характеристики и т.д.) зависят от технологии изготовления прибора, оптимизация конструкции НЕМТ-гетероструктур является актуальной задачей и должна сопровождаться теоретическими исследованиями электронных транспортных свойств. Известно, что введение δ -легированных слоёв вблизи квантовой ямы позволяет существенно повысить концентрацию носителей и проводимость двумерного газа без ухудшения подвижности.

Полупроводники типа $A^{III}B^V$ обладают целым рядом свойств, делающих их наиболее привлекательными для создания наногетероструктур. Вследствие прямозонности зонной структуры

они широко используются при создании различных оптических приборов, сравнительно малая эффективная масса электрона в таких материалах обеспечивает высокую подвижность электронов. Одновременно с этим, наличие тяжёлых элементов (таких, как индий в материалах $\text{InAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) приводит к высокому значению g -фактора, что делает данные материалы перспективными для создания приборов спинтроники.

Полупроводниковые нанопроволоки и нанотрубки вызывают огромный интерес исследователей благодаря высокой степени локализации носителей заряда в одномерной структуре. Поскольку нанопроволоки характеризуются большим отношением площади поверхности к объёму, даже незначительные внешние воздействия могут приводить к заметным изменениям их транспортных характеристик. Обладая высокой чувствительностью, они могут быть использованы в качестве рабочего элемента полевых транзисторов или электрических сенсоров. Одним из наиболее перспективных материалов для создания нанопроволок является InAs . Благодаря малой эффективной массе носителей и особенностям поверхностных состояний в InAs , нанопроволоки могут быть проводящими без дополнительного легирования. Низкое контактное сопротивление, в сравнении с самой нанопроволокой, позволяет легко интегрировать их в различные технологии полупроводниковых приборов. При этом необходимы дополнительные исследования возможности управления транспортом носителей заряда в подобных структурах.

Наличие в гетероструктурах тяжёлых элементов и асимметрии потенциала приводит к необходимости учёта спин-орбитального взаимодействия (СОВ), которое лежит в основе множества физических эффектов, таких как спин-гальванический эффект, спиновый эффект Холла, спиновая релаксация, перестраивая при этом энергетический спектр структур. Особое место во многих исследованиях последнего времени уделяется вычислению соотношения между основными параметрами СОВ Рашба и Дрессельхауза, которое имеет большое значение во многих спин-зависимых явлениях. Экспериментальное определение параметров СОВ в каждом случае остаётся сложной задачей, так как сильно зависит от таких факторов, как: кристаллографическая ориентация, ширина ямы, электронная плотность, профиль легирования, деформации. Поэтому весьма важной является задача развития вычислительного подхода к прогнозированию спин-зависимых явлений.

Изучение гетероструктур представляет интерес с практической и с фундаментальной точки зрения благодаря возможности наблюдения различных квантово-механических явлений. Меняя состав и геометрию гетероструктур, можно управлять фундаментальными параметрами в слоях полупроводниковых кристаллов, такими как ширина запрещённой зоны, эффективная масса носителей заряда, подвижность, показатель преломления и т.д. Таким образом, квантово-размерные структуры представляют собой системы с большим количеством особенностей и па-

раметров, причём методика измерения характеристик и технология получения подобных структур является достаточно сложной и дорогостоящей процедурой.

Численное моделирование позволяет проследить корреляцию между технологическими параметрами роста и энергетическим спектром структур с произвольным составом и геометрией. Данные расчёты могут быть полезны как на стадии проектирования и создания (т.е. узнавать их важные параметры *a priori*) приборов, так и на стадии обработки результатов, позволяя совершенствовать методы управления.

Степень разработанности темы исследования

Одним из методов экспериментального определения параметров структур является метод вольт-фарадных измерений [1]. В микроэлектронной технологии данный метод давно используется для диагностики и контроля распределения легирующей примеси, глубоких уровней и пр. Однако следует отметить, что наличие квантово-размерных слоёв в наногетероструктурах качественно меняет вид вольт-фарадных характеристик [2]. Поскольку полученные экспериментально наблюдаемые профили концентрации в подобных структурах не всегда легко интерпретировать, возникает необходимость численного расчёта вольт-фарадных характеристик и профилей распределения квантовой концентрации. Одной из первых работ по данной теме является работа Штерна и Говарда [3]. В ней рассматривается влияние эффектов размерного квантования на тонкий инверсионный слой в МДП-структуре, определяются методы вычисления энергетического спектра на основе решения уравнений Шрёдингера и Пуассона. Данный подход с упрощением потенциала был обобщён в работе Летартре [4], и, используя упрощённую модель потенциала, был успешно применён для моделирования вольт-фарадных характеристик структуры с одиночной квантовой ямой. Непосредственное численное решение уравнения Пуассона позволило получить прецизионное моделирование вольт-фарадных характеристик для структур с квантовыми ямами (КЯ) [5–7]. При этом в литературе крайне мало данных о расчётах вольт-фарадных характеристик и профилей концентрации для структур, содержащих дельта-легированные слои, хотя информация о подобных зависимостях важна при создании многих приборов.

В текущей литературе присутствует ряд работ, посвящённых теоретическому и экспериментальному исследованию свойств нанопроволок. Однако ранее анализ электронного газа, образуемого в данных структурах, проводился на основе цилиндрической модели, которая исключает азимутальную неравномерность распределения носителей [8]. Часть работ посвящена исследованию структур типа «ядро-оболочка» (англ. core-shell), состоящих из гетеропары узко-

зонного и широкозонного полупроводников [9, 10]. В данных структурах носители концентрируются в т.н. «ядре» нанопроволоки (внутренняя часть), в результате чего исключается влияние поверхностных состояний, пренебрегается влиянием диаметра нанопроволоки и температуры. Таким образом, анализа распределения электронного газа в InAs нанопроволоках и влияния на него поверхностных состояний и геометрии структур в литературе не проводился.

В ряде работ [11–14] делается акцент на вычислении параметров СОВ для самой низкой электронной подзоны в КЯ. При этом некоторые экспериментальные данные показывают, что в зоне проводимости КЯ носителями может быть населена более чем одна подзона [15–18]. Теоретическое описание СОВ в КЯ с двумя подзонами было впервые предложено в [19] и затем разработано в [20, 21]. В этих работах авторы, использующие 8-зонную модель Кейна, получили эффективный 2-зонный гамильтониан в базисе огибающих ВФ, содержащий как внутри-, так и межподзонные линейные члены СОВ. Во всех этих работах [11–14, 19–21] использовалась процедура усреднения добавок СОВ (Рашба, либо Рашба и Дрессельхауза) по состояниям, полученным в приближении огибающей, которая была впервые предложена Дьяконовым и Качоровским [22]. Основным преимуществом данного подхода является полуаналитический способ получения выражений для параметров СОВ: необходимо вычислить огибающую функцию, а затем определить существенные матричные элементы. Однако в этой процедуре не принимается во внимание ряд эффектов, таких как непараболичность зоны проводимости, которые точно могут быть учтены в рамках модели Кейна. При этом расчётов отдельных вкладов в линейное по волновому вектору СОВ Рашба и Дрессельхауза непосредственно в базисе 8-зонной модели Кейна для структур с произвольным видом потенциала не проводилось.

Цели и задачи диссертационного исследования

Целями данного диссертационного исследования являются:

- Исследование оптоэлектронных и электрофизических характеристик гетероструктур с одномерным квантовым ограничением на основе разработанного алгоритма согласованного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона.
- Исследование закономерностей образования электронного газа в нанопроволоках и нанотрубках на основе обобщённого алгоритма решения уравнений Шрёдингера и Пуассона. Исследование влияния магнитного поля на энергетический спектр и проводимость данных структур.
- Исследование энергетического спектра в структурах с квантовыми ямами с учётом СОВ.

Изучение влияния различных параметров гетероструктуры на соотношение параметров Рашба и Дрессельхауза на основе алгоритма численного решения уравнений шрёдингеровского типа с учётом межзонного взаимодействия.

В задачи диссертационного исследования входит:

1. Разработка алгоритма численного решения согласованных уравнений Шрёдингера и Пуассона для структур с одномерным квантовым ограничением и произвольным профилем состава и легирования. Создание процедур пост-обработки результатов численного моделирования для получения спектров фотолюминесценции, вольт-фарадных характеристик, профилей наблюдаемой концентрации.
2. Численный расчёт энергетического спектра, профиля зоны проводимости, вольт-фарадных характеристик, спектра фотолюминесценции для гетероструктур $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs, содержащих квантовые ямы и δ -легированные слои. Оптимизация технологических режимов получения НЕМТ-структур с целью улучшения электрофизических параметров.
3. Усовершенствование алгоритма численного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона для нахождения характеристик произвольных структур с двумерным квантовым ограничением в продольном магнитном поле.
4. Расчёт энергетического спектра, профилей распределения носителей в нанопроволоках и нанотрубках на основе InAs и InAs/Si в зависимости от геометрических параметров, внешнего затворного напряжения и приложенного магнитного поля.
5. Обобщение разработанного алгоритма дискретизации уравнения Шрёдингера для моделирования многозонных гамильтонианов на основе модели Кейна. Разработка методики извлечения из результатов моделирования параметров спин-орбитального взаимодействия для каждой из подзон энергетического спектра.
6. Численный расчёт энергетического спектра квантовых ям на основе гетероструктур $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs и $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ /GaSb в зависимости от профиля состава и приложенного электрического поля. Анализ соотношения параметров спин-орбитального взаимодействия Рашба и Дрессельхауза. Выявление условий возникновения устойчивых спиновых хеликсов (англ. persistent spin helices).

Научная новизна

1. На основе самосогласованного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона развит единый численный подход к анализу электрофизических, оптических, спиновых характеристик гетероструктур различной размерности с учётом межзонного взаимодействия.
2. Методами численного расчёта впервые проведён количественный анализ неравномерности распределения электронного газа в нанопроволоках InAs с гексагональным и треугольным поперечным сечением с учётом свойств поверхности данных структур.
3. На основе 8-зонной модели Кейна и конечно-разностной схемы разработана методика численного расчёта отдельного вклада линейных параметров спин-орбитального взаимодействия Рашба и Дрессельхауза в структурах с двумерным электронным газом для произвольной электронной подзоны размерного квантования.
4. Методами численного расчёта получены значения внешнего приложенного электрического поля, соответствующие реализации равенства модулей параметров Рашба и Дрессельхауза в гетероструктуре GaAs/InGaAs/GaAs.

Теоретическая и практическая значимость

Разработанный в ходе работы программный комплекс позволяет решать широкий круг задач численного моделирования для наноструктур. В частности, он позволяет проводить количественный и качественный анализ энергетического спектра гетероструктур на основе полупроводников $A^{III}B^V$ с произвольным профилем состава.

Для двойной туннельно-связанной квантовой ямы получены оптимальные геометрические параметры, позволяющие наблюдать эффекты пространственного переноса. В квантовых ямах с односторонним дельта-легированием показано, что с точки зрения управления двумерным каналом и повышения подвижности, более выгодной является конфигурация структуры КЯ перед дельта-слоем.

Полученные в результате моделирования вольт-фарадные, оптические и энергетические характеристики позволяют связать свойства приборов с технологическими особенностями их роста, решать проблемы диагностики и дизайна приборов современной наноэлектроники.

Результаты анализа закономерностей формирования электронного газа в InAs нанопроволоках реальной формы могут быть использованы при конструировании полупроводниковых приборов и тестовых структур на основе InAs нанопроволок и нанотрубок.

Показано, что прикладывая внешнее электрическое поле в структурах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ (100) возможно управление соотношением параметров Рашба и Дрессельхауза, в частности, равенство модулей параметров $|\alpha_n/\beta_n| = 1$, соответствующее реализации устойчивого спинового «хеликса». На практике данное состояние позволяет существенно замедлить процессы спиновой релаксации, что является актуальным для дизайна приборов спинтроники.

Методология и методы исследования

При решении поставленных задач применялись апробированные и известные в литературе методы теории твёрдого тела и численного моделирования: приближение огибающей функции, приближение эффективной массы и $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -метод для расчёта спектра гетероструктур. Непосредственный численный расчёт проводился на основе согласованного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона с использованием конечно-разностной схемы дискретизации.

Положения, выносимые на защиту

1. Численное моделирование профиля наблюдаемой концентрации носителей заряда в квантово-размерных структурах $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ с дельта-легированными слоями позволяет скорректировать реальные параметры дельта-слоя, в том числе его положение относительно квантовой ямы.
2. Увеличение диаметра гексагональных нанопроволок InAs приводит к усилению локализации носителей заряда вблизи их рёбер. Вследствие этого зависимость плотности заряда от напряжения, приложенного к грани нанопроволоки, носит ступенчатый характер.
3. В гетероструктурах $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ (100) для высших электронных подзон размерного квантования параметр Дрессельхауза немонотонно зависит от ширины квантовой ямы.
4. При приложении поперечного электрического поля величиной менее 6 мВ/нм в гетероструктурах $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ (100) возможна реализация равенства модулей параметров Рашба и Дрессельхауза, что соответствует формированию устойчивых спиновых хеликсов.

Личный вклад автора

Автор внёс основной вклад в получение результатов диссертационной работы в течение всех её этапов: в постановке и решении рассматриваемых задач, выборе и обосновании при-

меняемых физических моделей, разработке алгоритмов и программных технологий численного решения, обсуждении и интерпретации полученных результатов и соответствующих экспериментальных данных, а также подготовки к публикации результатов работы.

Степень достоверности полученных результатов

Достоверность полученных в ходе работы результатов исследования обеспечивается оптимальным выбором физических моделей для описания свойств исследуемых систем, согласованностью с существующими в литературе экспериментальными, теоретическими и расчётными результатами. Дополнительный вклад в достоверность вносят проведённые процедуры верификации алгоритмов численного моделирования по отношению к аналитическим оценкам и литературным данным.

Правильность результатов и выводов, полученных в работе, также неоднократно подтверждалась при её апробации.

Публикации и апробация результатов работы

Оригинальные результаты по теме диссертационного исследования представлены в 37 публикациях, из которых 7 — в рецензируемых научных изданиях [А1–А7], 30 — тезисы докладов по материалам диссертационного исследования на всероссийских, международных и региональных конференциях.

Результаты диссертации были представлены автором в период с 2013 по 2018 гг. на семинарах в Национальном исследовательском Нижегородском государственном университете им. Н.И. Лобачевского, Институте Полупроводников и Нанoeлектроники им. Петера Грюнберга (PGI-9) Исследовательского центра г. Юлих (Германия), а также доложены на международных и всероссийских научных конференциях, таких как:

- XVIII–XXII Международные симпозиумы «Нанofизика и нанoeлектроника», 2014–2018 гг., г. Нижний Новгород
- XIII Российская конференция по физике полупроводников, 2–6 октября 2017 г., г. Екатеринбург,
- XV–XVIII Всероссийские молодёжные конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и нанoeлектронике, 2013–2016 гг., г. Санкт-Петербург

- V Всероссийская конференция и школа молодых учёных и специалистов «Физические и физико-химические основы ионной имплантации», 27–31 октября 2014 г., г. Нижний Новгород
- Объединённая конференция "EP2DS-22 / MSS-18", 31 июля – 4 августа 2017 г., Университет штата Пенсильвания, Университи-Парк, шт. Пенсильвания, США
- Конференция "EMN Bangkok Meeting 2017", 12–16 ноября 2017 г., Бангкок, Таиланд

Структура и объём диссертации

Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка сокращений и условных обозначений, списка работ автора по теме диссертационного исследования, а также списка литературы, содержащего 141 наименование. Объём диссертации составляет 157 страниц, включая 75 рисунков и одну таблицу.

Глава 1

Литературный обзор

1.1 Введение

Одним из основных направлений развития современной нанoeлектроники является создание новых и совершенствование существующих полупроводниковых приборов на основе гетероструктур. Возможности современных методов технологий роста кристаллов (с точностью до нескольких монослоёв) позволяют осуществить переход к созданию структур пониженной размерности, в которых ярко выражены квантовые эффекты. Электроника на гетероструктурах находит широкое практическое применение в областях телекоммуникационной и вычислительной техники, в частности, для создания светодиодов, оптических модуляторов, резонансно-туннельных диодов, а также гетероструктурных биполярных транзисторов (НВТ), НЕМТ и Tri-gate транзисторов, приборов спинтроники. Изучение гетероструктур представляет интерес и с фундаментальной точки зрения благодаря возможности наблюдения различных квантово-механических явлений. Меняя состав и геометрию гетероструктур, можно управлять фундаментальными параметрами в слоях полупроводниковых кристаллов, такими как ширина запрещённой зоны, эффективная масса носителей заряда, подвижность, показатель преломления и т.д.

Для современного этапа развития приборов характерным является конструирование качественно новых систем с улучшенными характеристиками. Известно множество оптоэлектронных приборов на основе квантовых ям, квантовых нитей и квантовых точек. Например, лазеры на квантовых точках [23] обладают практически δ -образным спектром плотности состояний и гигантской силой осциллятора оптических переходов на единицу объёма, обусловленную эффективным перекрытием волновых функций электрона и дырки из-за их пространственной локализации. Кроме того, они обладают сверхвысокой температурной стабильностью порога-

вой плотности тока, гигантские коэффициенты максимального удельного усиления материала (material gain) и максимального дифференциального усиления материала (differential gain).

Электропоглощающий модулятор (англ. electroabsorption modulator) [24] представляет собой полупроводниковый прибор, который может использоваться для модулирования интенсивности лазерного луча с помощью электрического напряжения. Основным принципом является изменение в спектре поглощения, вызванное приложенным электрическим полем. В результате эффективно изменяется ширина запрещённой зоны, но при этом не происходит возбуждение носителей электрическим полем. Данные приборы отличаются малым размером и напряжением модуляции и являются перспективными для использования в телекоммуникационных приложениях. По сравнению с электрооптическими модуляторами они могут работать с гораздо меньшими напряжениями (несколько вольт вместо ≥ 10 В). Они могут работать на очень высокой скорости: ширина полосы модуляции составляет десятки ГГц, что делает данные приборы полезными для волоконно-оптической связи. Электропоглощающие модуляторы с полупроводниковой квантовой ямой широко используются для модуляции ближнего инфракрасного (NIR) излучения для частот ниже 0,1 ТГц. Также при помощи ИК-поглощения нелегированной квантовой ямы может быть модулировано сильное электрическое поле для частот 1,5–3,9 ТГц. Для этого могут быть использованы экситонные состояния в квантовых ямах, в результате чего полученное терагерцовое поле соответствует когерентной квантовой суперпозиции поглощающего и непоглощающего экситонов. Эта квантовая когерентность может дать новые приложения для модуляторов на основе квантовых ям в системах оптической связи.

Полевые транзисторы с высокой подвижностью электронов (НЕМТ) являются основой большинства современных устройств СВЧ электроники [25–27], в то время как самая современная компьютерная техника использует в своей основе многозатворные (Tri-gate) транзисторы [28]. Известно [25], что одностороннее и двустороннее δ -легирование области квантовой ямы позволяет существенно повысить концентрацию носителей и проводимость двумерного газа. В ряде случаев это может приводить и к увеличению подвижности двумерного канала. Поскольку основные параметры транзисторов, такие как предельная частота усиления, плотность тока, крутизна, шумовые характеристики и т.д. непосредственно зависят от технологии изготовления прибора, оптимизация конструкции РНЕМТ-гетероструктур является актуальной задачей и должна сопровождаться теоретическими расчётами транспортных свойств. Также необходимо совершенствовать методы неразрушающей диагностики выращиваемых структур.

Другой разновидностью структур пониженной размерности являются полупроводниковые нанопроволоки и нанотрубки. Они вызывают огромный интерес исследователей благодаря высокой степени локализации носителей заряда в одномерной структуре. Поскольку нанопро-

волокни характеризуются большим отношением площади поверхности к объёму, даже незначительные внешние воздействия могут приводить к заметным изменениям их транспортных характеристик [29–33]. Обладая высокой чувствительностью, они могут быть использованы в качестве рабочего элемента полевых транзисторов или электрических сенсоров. Высокая плотность поверхностных состояний на границе InAs нанопроволок обеспечивает высокую концентрацию носителей в данных структурах без дополнительного легирования. При этом конкретный вид распределения электронной плотности внутри нанопроволоки определяется её спектром размерного квантования и внутренним распределением электростатического потенциала.

Известно, что при понижении размерности происходит усиление спиновых явлений в полупроводниках. Поэтому квантово-размерные структуры всё чаще используются при проектировании приборов спинтроники. Спин-орбитальное взаимодействие (СОВ) приводит к перестройке энергетического спектра низкоразмерных систем, а также является причиной множества физических явлений, таких как спин-гальванический эффект [34], спиновый эффект Холла [35], спиновая релаксация [36], являющихся ключевыми для построения приборов на спин-зависимых эффектах. Необходимо отметить, что экспериментальное определение параметров СОВ в каждом случае остаётся сложной задачей [37] ввиду необходимости применения специальных методов исследования. В связи с этим для прогнозирования спиновых свойств необходим предварительный дизайн квантово-размерных гетероструктур с учётом СОВ. Модельные расчёты позволяют проследить корреляцию между технологическими параметрами роста и величиной СОВ в структурах с произвольным составом, оценить расщепление энергетических подзон, а также исследовать возможность управления соотношением параметров СОВ в различных гетеросистемах.

Таким образом, квантово-размерные структуры представляют собой системы с большим количеством особенностей и параметров, причём методика измерения характеристик и технология получения подобных структур является достаточно сложной и дорогостоящей процедурой. Отсюда вытекает необходимость задачи моделирования подобных систем в различных физических условиях как на стадии прогнозирования и создания (т.е. узнавать их важные параметры *a priori*), так и для более корректной интерпретации измерений и экспериментальных исследований.

Одним из методов численного моделирования, использованных в данной работе, являлось решение согласованного уравнения Шрёдингера в приближении эффективной массы и уравнения Пуассона. Для исследуемых структур, содержащих неоднородное и дельта-легирование, характерно сильное искажение электростатического потенциала. Реализация и улучшение данной методики для вычисления и исследования энергетических и ВФХ в сложных

гетероструктурах, в т.ч. содержащих дельта-легированные слои, являлась одной из задач, решаемых в ходе данной работы. Кроме того, в задачи входило исследование влияния технологических параметров роста, в т. ч. эффекта сегрегации на характеристики структур для различных профилей состава, при различном взаимном расположении квантовых ям и дельта-слоёв.

В данной работе путём непосредственного численного моделирования была предложена методика, позволяющую оценить параметр Дрессельхауза для симметричных квантово-размерных структур и количественно определить вклад Рашба в СОВ в присутствии асимметрии структуры, вызванной электрическим полем, приложенным в направлении её роста. Для гетероструктур $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ и $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}/\text{GaSb}$ изучаются зависимости параметров спинового расщепления от электрического поля для различных подзон размерного квантования и значений ширины КЯ.

1.2 Квантово-размерные эффекты и характеристики

1.2.1 Энергетический спектр в низкоразмерных системах

В данной работе рассматриваются физические эффекты, возникающие в квантово-размерных структурах. Особенностью таких структур является проявление квантовых эффектов: если размеры системы в каком-либо направлении становятся сравнимы с длиной волны Де Бройля, энергетический спектр квантуется, т.е. может принимать лишь некоторые дискретные значения E_n .

Интервал между дискретными энергетическими уровнями становится заметно больше $k_B T$, что может наблюдаться в физическом эксперименте. Из общих соображений и соотношения неопределённостей Гейзенберга можно показать, что для наблюдения квантовых размерных эффектов характерные размеры структур должны порядка нескольких десятков нм с условием наблюдений при комнатной температуре (или ниже), а также при подвижности носителей заряда не ниже $1000 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$. необходимым условием наблюдаемости указанных эффектов является высокое качество поверхностей раздела, создающих потенциал, в частности, коэффициент отражения частиц от границ должен быть достаточно высок, характерный размер шероховатости поверхностей также должен быть много меньше де Бройлевской длины волны частицы.

Одним из приближений для описания энергетического спектра исследуемых структур, используемых в данной работе, является приближение эффективной массы [38, 39]. Запишем стационарное одноэлектронное уравнение Шрёдингера для частицы (электрона) в кристалле:

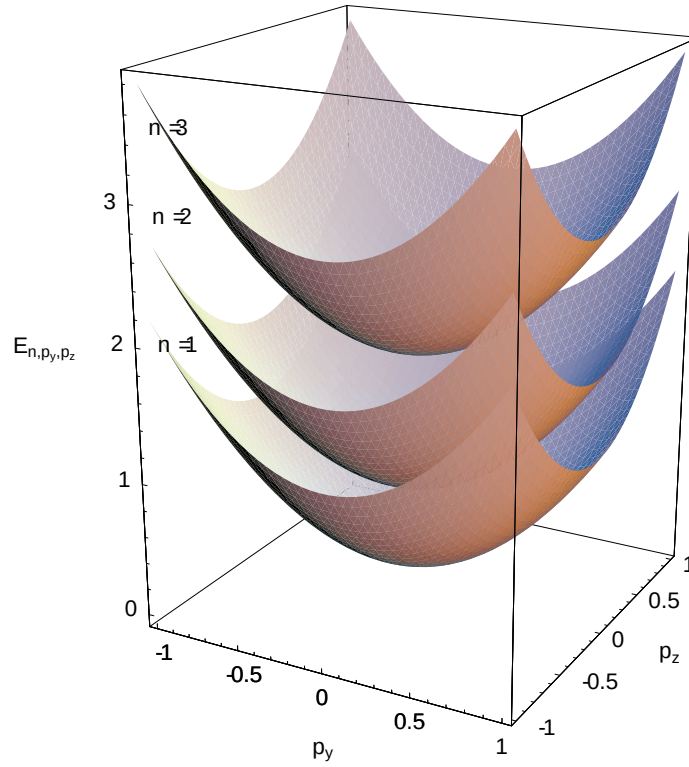


Рис. 1.1. Энергетический спектр частицы в квантовой яме

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}), \quad (1.1)$$

где $V(\vec{r})$ имеет периодичность решётки Браве:

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R}). \quad (1.2)$$

В бездефектном кристалле частицы описываются при помощи блоховских волн, которые могут свободно распространяться в кристалле. Согласно теореме Блоха, собственные функции Ψ оператора Гамильтона определяются произведением функции, описывающей плоскую волну, $e^{i(\vec{k}\vec{r})}$, и модулирующей функции $u_{\nu,\vec{k}}(\vec{r})$, периодической с периодом решётки:

$$\Psi_{\nu,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i(\vec{k}\vec{r})} u_{\nu,\vec{k}}(\vec{r}), \quad (1.3)$$

где ν — индекс зон, $\vec{k}$ — волновой вектор первой зоны Бриллюэна.

Как следствие теоремы Блоха, энергия электрона E есть периодическая функция $\vec{k}$. В отсутствие вырождения для дисперсионной зависимости $E(\vec{k})$ она представима в окрестности минимума энергии в параболическом виде:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (1.4)$$

где k — модуль волнового вектора, m^* — эффективная масса.

Таким образом, отношение эффективной массы к массе покоя частицы показывает влияние периодического потенциала кристалла на движение электронов. Эффективная масса является в общем случае анизотропной и описывается при помощи тензора обратной эффективной массы. Однако, поскольку в работе рассматриваются, в основном, прямозонные полупроводники типа $A^{III}B^V$, эффективная масса будет полагаться изотропной, если специально не указано иначе. Более того, в дальнейшем изложении знак звёздочки будет опущен, т.е. под m будет пониматься эффективная масса. Инертная масса свободного электрона будет обозначаться как m_0 .

В том случае, когда для частицы возможно задание потенциальной энергии, не связанное с периодическим потенциалом кристалла (когда это возможно, будет рассмотрено ниже), а также не зависящее от времени, уравнение движения частицы записывается в виде стационарного уравнения Шрёдингера в приближении эффективной массы:

$$\left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + U(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}). \quad (1.5)$$

В случае, когда $U(\vec{r}) = U(x)$ (одномерный потенциал), решение уравнения (1.5) представимо в виде

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi(x)\Psi(y)\Psi(z), \quad (1.6)$$

где $\Psi(y)$ и $\Psi(z)$ соответствуют движению квазисвободной (т.е. на движение влияет только периодический потенциал кристаллической решётки) частицы.

В качестве примера рассмотрим случай, при котором $U(x)$ задаётся в виде бесконечно-глубокой потенциальной ямы:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & , \text{ при } |x| \leq \frac{a}{2}, \\ +\infty & , \text{ при } |x| > \frac{a}{2}. \end{cases} \quad (1.7)$$

В частности, такой вид потенциала характерен для таких структур, как квантово-размерная плёнка [38], его двумерный аналог с ограничением по двум осям соответствует полу-

проводниковой нанопроволоке с нулевым электрическим полем. При подстановке (1.7) в (1.5) получим решение:

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n}{a}x\right). \quad (1.8)$$

Для движения, зависящего от других координат, получим решения для квазисвободной частицы:

$$\begin{aligned} \Psi(y) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ip_y y}{\hbar}}, \\ \Psi(z) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ip_z z}{\hbar}}. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Выражение для энергии частицы запишется следующим образом:

$$E_{n,p_y,p_z} = \frac{(\pi\hbar n)^2}{2ma^2} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m}, \quad (1.10)$$

т.е. движение частицы определяется непрерывно меняющимися квантовыми числами p_y и p_z , а также дискретным натуральным квантовым числом n . Спектр (1.10) графически представлен на рис. 1.1.

Множество состояний с заданным числом n называют подзоной размерного квантования. Кроме того, существуют структуры, в которых присутствует квантовое ограничение носителей заряда в двух измерениях (квантовые нити и нанопроволоки), и в трёх (квантовые точки). Далее в работе будут рассмотрены структуры, содержащие квантовые ямы, а также полупроводниковые нанопроволоки, обладающие двумерным квантовым ограничением.

1.2.2 Плотность состояний в низкоразмерных структурах

Важной характеристикой физической системы, наряду с её энергетическим спектром является плотность состояний $g(E)$. Как известно [38,40], для объёмного материала с параболическим законом дисперсии (1.4), с увеличением энергии от края разрешённой зоны $g(E)$ меняется как $\sqrt{E}$ (см. рис. 1.2).

Рассмотрим $g(E)$ для структур с одномерным и двумерным квантовым ограничением, для этого найдём выражение для полного числа состояний в интервале энергий от 0 до E в одной подзоне размерного квантования с индексом i . Учитывая параболическость закона дисперсии, получим выражение для импульса электронов с энергией E : $p = \sqrt{2m(E - E_i)}$. Эти электроны будут занимать в фазовом пространстве $(\vec{r}|\vec{p})$ объём $\int d\vec{p}d\vec{r}$, равный $L_x L_y \pi p^2 = 2\pi L_x L_y m(E - E_i)$ для одномерного квантового ограничения и $2pL_x =$ для двумерного квантового ограничения.

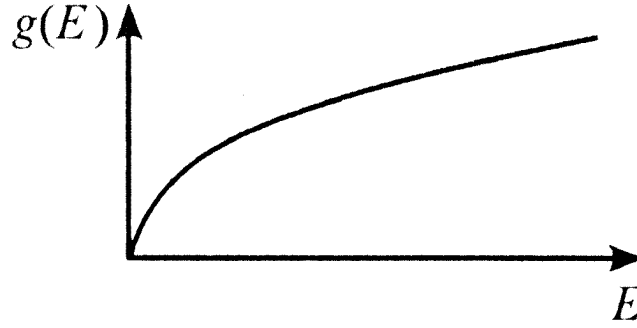


Рис. 1.2. Плотность состояний для системы с параболическим законом дисперсии

Продифференцируем данный объём по энергии E с учётом того, что на каждое состояние приходится элементарный объём $(2\pi\hbar)^d$, где d — размерность пространства свободного движения. Просуммировав по всем подзонам, получим выражения для плотности состояний в случае одномерного квантового ограничения:

$$g_{2D}(E) = \frac{L_x L_y m}{2\pi\hbar^2} \sum_i \Theta(E - E_i), \quad (1.11)$$

и двумерного квантового ограничения:

$$g_{1D}(E) = \frac{\sqrt{2m}L_x}{\pi\hbar} \sum_i \frac{\Theta(E - E_i)}{\sqrt{E - E_i}}, \quad (1.12)$$

где $\Theta(E)$ — функция Хевисайда.

Вид данных зависимостей плотности состояний показан на рис. 1.3

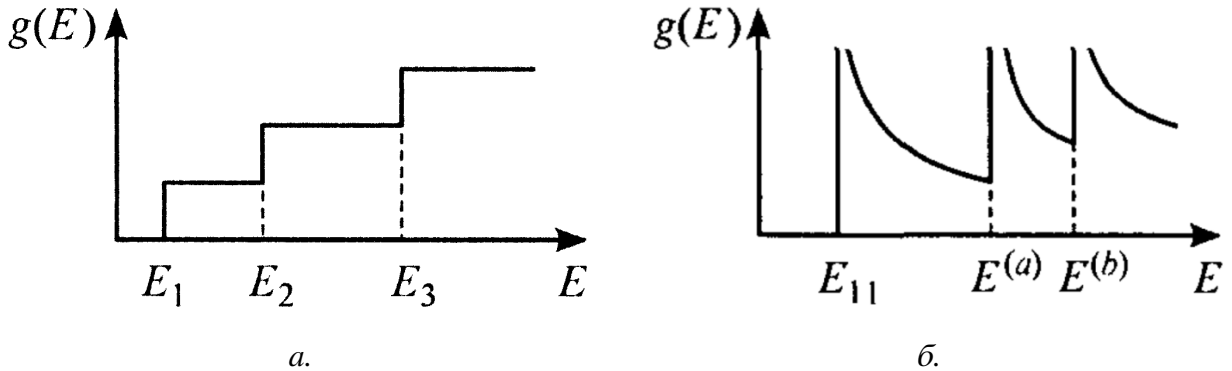


Рис. 1.3. Плотность состояний в системах с одномерным квантовым ограничением (а.) и двумерным квантовым ограничением (б.)

Поскольку в реальных структурах глубина потенциальной ямы конечна (профиль потенциальной энергии значительно отличается от (1.7)), энергетический спектр имеет как дискретный, так и непрерывный участки (рис. 1.4). В общем случае аналитическое вычисление плотности состояний для таких систем оказывается невозможным в силу неопределённости координаты и импульса для непрерывного спектра. Поэтому, строго говоря, использование выражения (1.11) возможно, лишь когда концентрация носителей на состояниях дискретного спектра много выше концентрации носителей непрерывного спектра, что справедливо не всегда. Особое значение данная проблема приобретает при больших напряжениях смещения в решении задачи моделирования вольт-фарадных характеристик (ВФХ). Однако, участок непрерывного спектра может быть с высокой степенью точности аппроксимирован дискретным, полученным в результате численного расчёта. Данный подход и был использован в работе, ранее о нём говорилось в работах [5, 7].

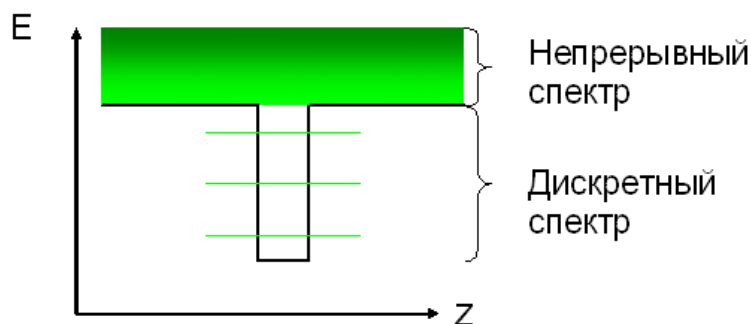


Рис. 1.4. Дискретный и непрерывный участки энергетического спектра частицы в квантовой яме

1.3 Методы изготовления квантово-размерных структур

1.3.1 Материалы, используемые для получения гетероструктур

В качестве материалов для создания наногетероструктур наиболее привлекательны полупроводники типа $A^{III}B^V$, обладающие целым рядом интересных свойств. Вследствие прямозонности зонной структуры они широко используются при создании различных оптических приборов, сравнительно малая эффективная масса электрона в таких материалах обеспечивает высокую подвижность электронов. Одновременно с этим, наличие тяжёлых элементов (таких, как индий в материалах $InAs/In_xGa_{1-x}As$) приводит к высокому значению g -фактора, что делает данные материалы перспективными для создания приборов спинтроники.

Такие свойства, как высокая подвижность электронов порядка $8500 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$, ширина запрещённой зоны и напряжённость поля пробоя — $1,42 \text{ эВ}$ и $4 \times 10^5 \text{ В/см}$ соответственно, делают GaAs одним из основных материалов в микро- и нанoeлектронике [41]. В настоящее время структуры из данной группы с различным сочетанием состава $\text{In}_{0,52}\text{Al}_{0,48}\text{As}/\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}/\text{In}_{0,52}\text{Al}_{0,48}\text{As}/\text{InP}$ успешно применяются при создании ряда твердотельных СВЧ-приборов и монолитных интегральных схем для систем связи, радиолокации, радиоастрономии и т.д. Гетеросоединения, содержащие слои тройного твёрдого раствора $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ перспективны для создания мощных приборов с низким уровнем шумов и высоким быстродействием.

Для объяснения понятия квантовой ямы рассмотрим случай прямоугольной квантовой ямы. Физически данная система представляет собой два слоя полупроводника В, окружающих достаточно тонкий слой (см. выше) толщины полупроводникового материала А. Направление, перпендикулярное к этим слоям, примем за ось x .

Пусть ширина запрещённой зоны ямы (полупроводник А) меньше, чем у барьеров (полупроводниковый материал В). Вследствие такого различия в ширине запрещённых зон не происходит выравнивания краёв зон проводимости и валентных зон для А и В. разность между их краями называется разрывом зон.

Разрыв зон создаёт потенциал, ответственный за квантовое ограничение носителей только в одном слое, в результате чего и возникает квантовый размерный эффект, некоторые из следствий которого описаны выше. Таким образом, знание величины разрыва зон и его контроль играют решающую роль при изготовлении приборов с квантовым размерным эффектом. Многочисленные сравнения экспериментальных результатов и теоретических расчётов показали, что разрывы краёв зон могут быть весьма резкими. Последнее делает простую прямоугольную яму хорошим приближением для большинства КЯ. В качестве характеристики разрыва зон был введён множитель Q [43], равный отношению между разрывом зон проводимости и разностью между шириной запрещённых зон.

Несмотря на то, что прямоугольный потенциал в квантовых ямах является не единственным из существующих в наноструктурах, он, тем не менее, встречается достаточно часто. Получение резких границ накладывает жёсткие ограничения на условия роста, такие как чистота исходных материалов, температура подложки и др. Однако, в конечном счёте, качество гетероперехода определяется их химическими и физическими свойствами. Одной из наиболее важных причин рассогласования слоёв является различие постоянных решётки гетероматериалов, составляющих переход. В случае, если их значения достаточно близки, происходит деформация решёток материала, приводящая к появлению механических напряжений. Постоянные решётки

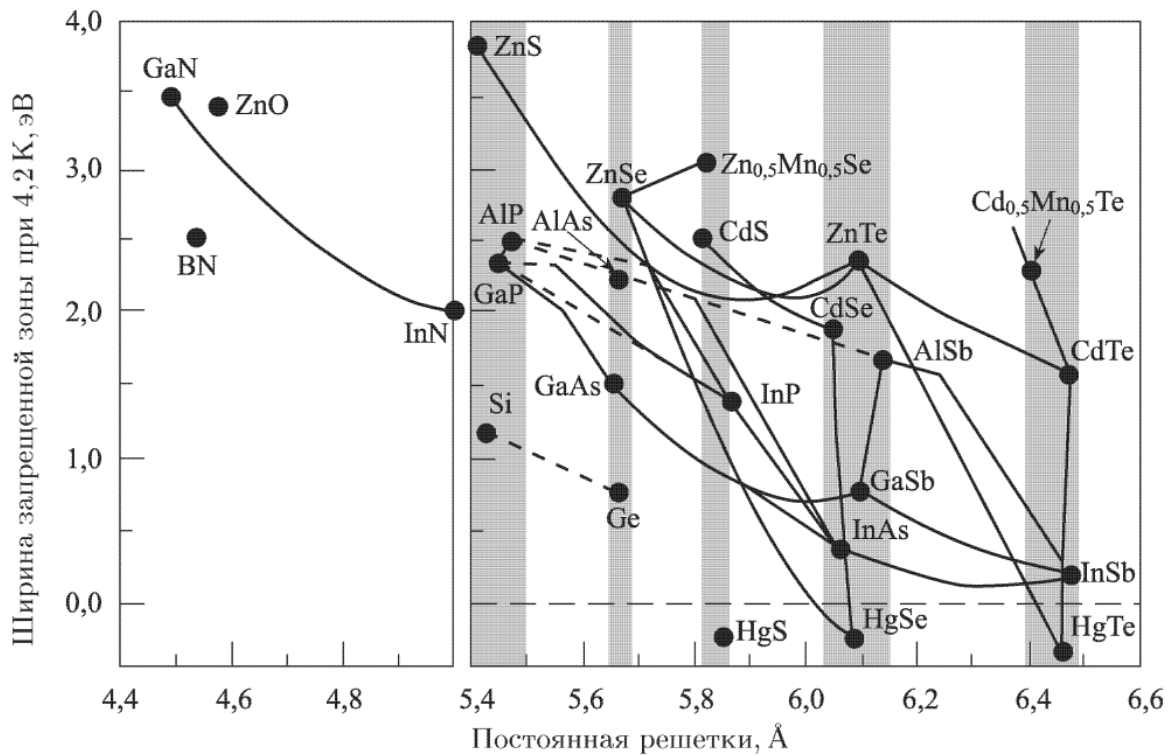


Рис. 1.5. График зависимости энергии запрещенной зоны при низкой температуре от постоянной решетки для ряда полупроводников со структурой алмаза и цинковой обманки. Затененные области объединяют группы полупроводников с близкими постоянными решетками. Полупроводники, соединенные сплошными линиями, образуют между собой стабильные твердые растворы [42]. Отрицательное значение, приведенное для энергии запрещенной зоны HgSe, является спорным. Штриховые линии указывают на непрямые запрещенные зоны

в плоскости роста при этом сравниваются, данный рост называется псевдоморфным. Для каждого состава известна критическая толщина слоя, выращиваемого таким способом, при превышении которой, происходит релаксация возникших механических напряжений сопровождаемых генерацией большого количества дислокаций. Существует всего несколько систем, у которых постоянные решетки очень близки. На рис. 1.5 приведена зависимость ширины запрещенной зоны при низких температурах от постоянной решетки для ряда полупроводников со структурой алмаза и цинковой обманки.

Материалы в пределах одной затененной области, но с разной шириной запрещенных зон, можно, представляется возможным использовать для получения гетеропереходов с некоторой величиной разрыва зон. Возможности выбора величины разрыва зон можно расширить посредством роста двойных (таких как SiGe), тройных (AlGaAs) и четверных (GaInAsP) твердых растворов. Сплошные линии на рис. 1.5, соединяющие некоторые полупроводники, показывают,

что эти материалы образуют стабильные твёрдые растворы во всём диапазоне концентраций (например, InGaAs, GaAlAs и InGaP). Руководствуясь приведённым рисунком, представляется возможным создавать гетеропереходы с требуемой величиной разрыва зон или КЯ с заданной формой потенциала.

1.3.2 Метод молекулярно-лучевой эпитаксии для получения гетероструктур

Одним из самых распространённых методов получения квантово-размерных структур является молекулярно-лучевая эпитаксия [38], которая представляет собой усовершенствованную разновидность методики термического напыления в условиях сверхвысокого вакуума. Давление остаточных газов в вакуумной камере поддерживается ниже 1×10^{-8} Па.

Потоки атомов или молекул образуются за счёт испарения жидких или сублимации твёрдых материалов, которые располагаются в источнике — эффузионной ячейке. Эффузионная ячейка представляет собой цилиндрический, либо конический тигель диаметром 1–2 см и длиной 5–10 см. На выходе ячейка имеет круглое отверстие – диафрагму диаметром 5–8 мм. Для изготовления тигля используют пиролитический графит высокой чистоты, либо нитрид бора.

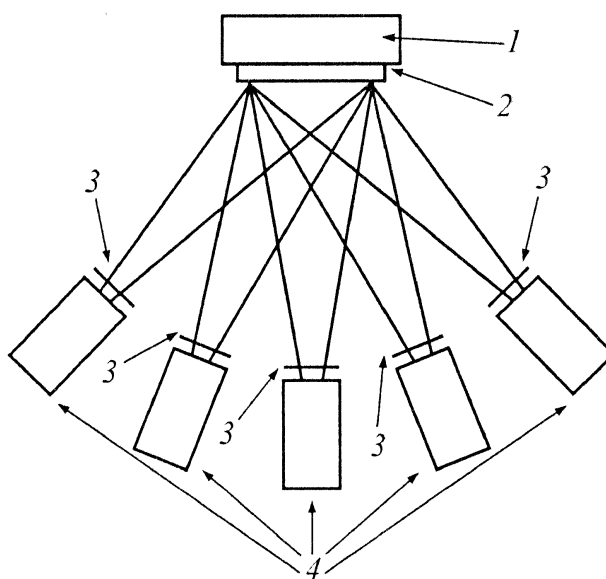


Рис. 1.6. Схематическое изображение основных узлов установки для молекулярно-лучевой эпитаксии. На рисунке обозначены: 1 — подложка; 2 — растущая плёнка; 3 — заслонки; 4 — эффузионные ячейки

Потоки атомов (или молекул) необходимых элементов направляются на подложку и оса-

ждаются с образованием вещества требуемого состава. Схематическое изображение основных узлов установки молекулярно-лучевой эпитаксии приведено на рис. 1.6. Количество эффузионных ячеек зависит от состава плёнки и наличия легирующих примесей. Для выращивания элементарных полупроводников (Si, Ge) требуется один источник основного материала и источники легирующей примеси n- и p-типа. В случае сложных полупроводников (двойных, тройных соединений) требуется отдельный источник для испарения каждого компонента плёнки (например, для AlGaAs требуются отдельные источники Al, Ga, As). Температура эффузионной ячейки определяет величину потока частиц, поступающих на подложку, и тщательно контролируется. Управление составом основного материала и легирующих примесей осуществляется с помощью заслонок, перекрывающих тот или иной поток. Если в ходе выращивания структуры требуется резко менять концентрацию одной и той же примеси, то используют несколько источников этой примеси при разной температуре эффузионной ячейки. Однородность состава плёнки по площади и её кристаллическая структура определяются однородностью молекулярных пучков. В некоторых случаях для повышения однородности подложка с растущей плёнкой постоянно вращается.

1.3.3 Гетероструктуры с дельта-легированными слоями

Дельта-слоем [44] называют участок полупроводникового образца с предельно неоднородным профилем легирования, где примесные ионы сосредоточены в очень тонком слое в один или несколько периодов решётки. Введение дополнительной легирующей примеси позволяет повысить концентрацию и подвижность проводящего канала, при этом, однако, данные слои создают дополнительные потенциальные ямы барьеры вблизи КЯ и могут существенно изменить энергетический спектр квантовых состояний электронов и дырок. В тексте работы дельта-слои также обозначены как « δ -слои». В существующей литературе создавались как структуры с дельта-слоями n-типа, например, на основе Si [44], так и с дельта-слоями p-типа [45]. Носители, образовавшиеся при ионизации примесей, удерживаются их зарядом вблизи плоскости слоя, однако возникшее электрическое поле экранируется вдали от легированного слоя, в результате чего образуется V-образная потенциальная яма (например, при рассмотрении донорного дельта-слоя по отношению к электронам в зоне проводимости) или барьер. При рассмотрении образованных таким образом потенциальных ям оказывается, что в них проявляются эффекты размерного квантования, описанные выше и возможно рассмотрение носителей с тех же позиций, что и для квантовых ям, образованных разрывом зоны проводимости. Схематическое изображение зонной диаграммы квантовой ямы, образованной дельта-легированным слоем, приведено на рис. 1.7.

Глубина и форма потенциала образованной таким образом квантовой ямы, а также распределение в ней носителей заряда и уровней размерного квантования зависит от ряда параметров, в т.ч. от величины легирования дельта-слоя, оказывает влияние размытие слоя на несколько периодов решётки. Весьма существенное влияние могут оказывать находящиеся близко по расстоянию другие дельта-слои и квантовые ямы.

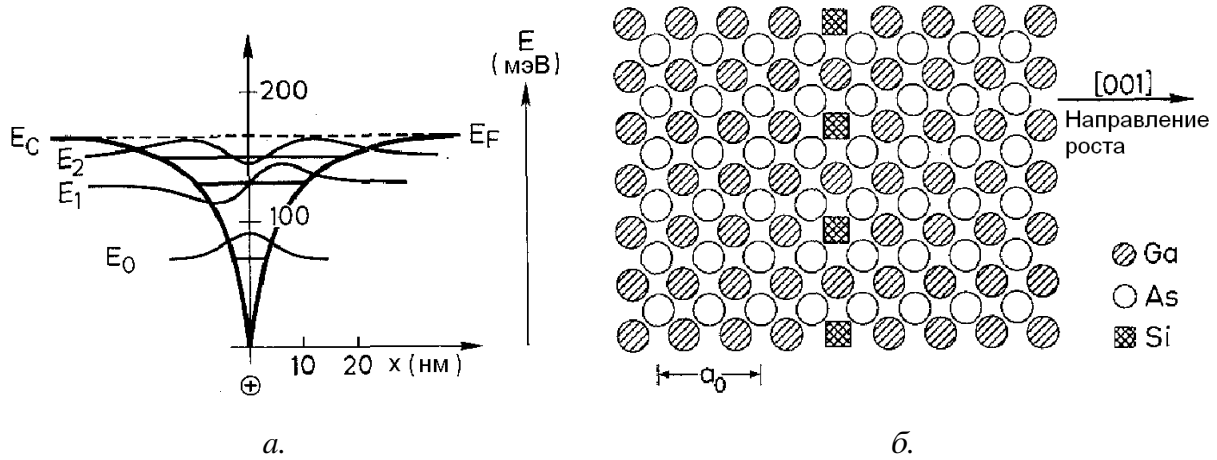


Рис. 1.7. Зонная диаграмма (а.) и схема (б.) дельта-слоя

Из литературы известны методики диагностики параметров и свойств структур, содержащих одиночные дельта-легированные слои, состоящие из них сверхрешётки [28, 38]. Однако важной остаётся проблема их численного моделирования. Аналитические модели, позволяющие оценить ряд характеристик подобных структур [46], однако в них не учитываются эффекты, связанные с легированием прочих областей структуры, а также взаимодействием дельта-слоёв с квантовыми ямами и барьерами, что является существенным для структур, рассматриваемых в настоящей работе.

1.3.4 Получение и методы исследования полупроводниковых нанопроволок

Нанопроволоки являются ярким представителем низкоразмерных структур благодаря особенностям электронного и дырочного газа, образующегося в них. Благодаря высокому отношению площади поверхности к объёму, нанопроволоки характеризуются повышенной чувствительностью к внешним воздействиям. Таким образом, возникает возможность управления транспортом носителей заряда и использования их в качестве рабочего элемента полевых транзисторов или электрических сенсоров [29]. Данные структуры могут широко применяться при

создании приборов опто- и нанoeлектроники, а также создания приборов спинтроники [30–33]. Движение носителей в них ограничено теперь уже в двух направлениях, при этом их свойства определяются характеристиками материалов. Использование полупроводниковых материалов типа $A^{III}B^V$ для изготовления нанопроволок позволяет путём варьирования геометрии и состава управлять энергетическими свойствами структур.

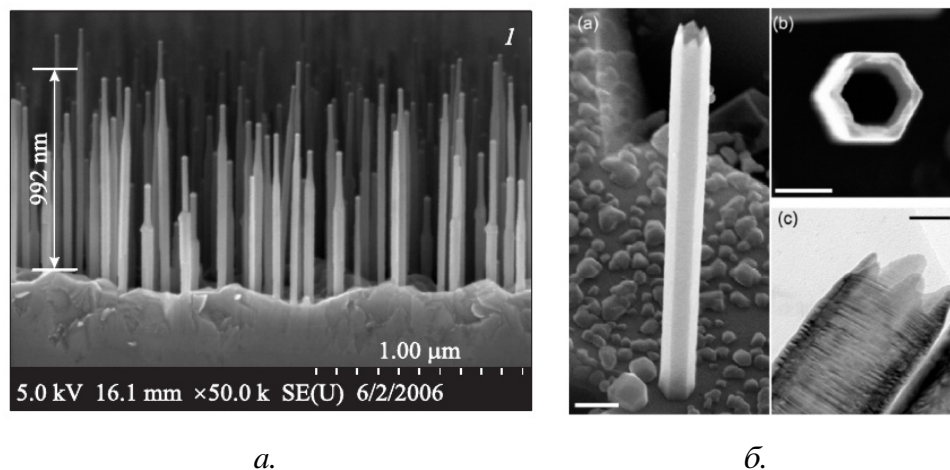


Рис. 1.8. СЭМ-изображения полученных в эксперименте InP/InAsP/InP нанопроволок (а.) [47] и InAs нанотрубок (б.) [48]

Материал InAs является весьма перспективным для создания нанопроволок благодаря низкому значению эффективной массы носителей, большой величине g - фактора, а также особенностям поверхностных состояний. Известно, что при соприкосновении с воздухом на поверхности данного соединения образуются поверхностные состояния большой плотности [49–57]. Благодаря значительному вкладу данных состояний донорного типа, поставляющих носители в объём, нанопроволоки InAs обладают проводимостью n -типа без дополнительного легирования [58–68]. Поскольку приповерхностный слой обогащён электронами контактное сопротивление нанопроволок весьма невелико [59]. При этом свойства электронного газа, образованного в InAs нанопроволоках, в значительной степени определяются особенностями поверхностных состояний и геометрией сечения нанопроволок [58, 67, 69–76].

С другой стороны, состояние поверхности нанопроволоки может сильно зависеть от концентрации и распределения носителей заряда внутри. В данной работе рассмотрены преимущественно InAs нанопроволоки и нанотрубки. Обычно они выращиваются методом молекулярно-лучевой эпитаксии на GaAs подложке, покрытой тонким слоем SiO_2 [48, 77]. Вертикальный рост таких нанопроволок происходит благодаря каталитическому действию капли InAs. Другим пространственным методом является газофазная эпитаксия, в случае которой вертикальный рост

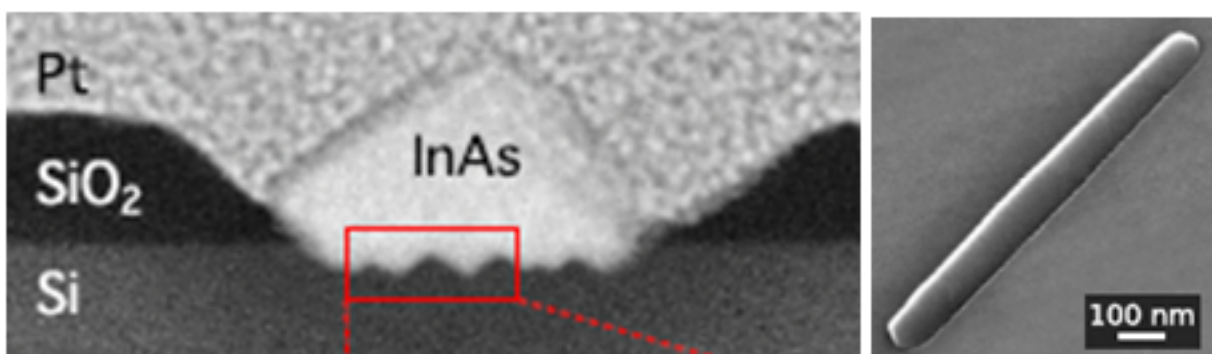


Рис. 1.9. СЭМ-изображения латеральных InAs нанопроволок [77]

нанопроволок начинается только в отверстиях, нанесённых на слое SiO_2 литографическим методом. Данные нанопроволоки имеют гексагональное поперечное сечение. На рис. 1.8 показаны их экспериментальные изображения, полученные при помощи методов сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). Метод газофазной эпитаксии используется также для создания латеральных InAs нанопроволок, которые при определённых условиях растут в канавке, вытравленной в слое SiO_2 , покрывающем кремниевую подложку [77]. Форма поперечного сечения этих нанопроволок близка к треугольной (см. рис. 1.9).

В литературе присутствуют работы, посвящённые теоретическому и экспериментальному исследованию свойств нанопроволок. Однако ранее, анализ электронного газа, образуемого в данных структурах, проводился на основе цилиндрической модели, которая исключает азимутальную неравномерность распределения носителей. Часть работ посвящена исследованию структур типа «ядро-оболочка» (англ. core-shell), состоящих из гетеропары узкозонного и широкозонного полупроводников [9, 10]. В данных структурах носители концентрируются в т.н. «ядре» нанопроволоки (внутренняя часть), в результате чего исключается влияние поверхностных состояний, пренебрегается влиянием диаметра нанопроволоки и температуры.

Существует ряд расчётов и анализ распределения носителей для упрощённого цилиндрического сечения нанопроволоки [8], в то время как в данной работе было проведено детальное исследование зависимостей вида пространственного распределения в InAs нанопроволоках. Рассмотрены зависимости от геометрии, свойств поверхностных состояний для различных форм поперечного сечения. Известно [78], что одним из свойств данных структур является наличие осцилляции проводимости в продольном магнитном поле благодаря эффектам квантовой интерференции. В работе рассматривалось влияние продольного магнитного поля на спектр размерного квантования, и проводилась оценка осцилляций проводимости. Для расчётов использовалось решение уравнения Шрёдингера для двумерного квантового ограничения, самосогласованное с

уравнением Пуассона. Также проведено сравнение с цилиндрической моделью.

1.4 Численное решение уравнений Шрёдингера и Пуассона

Как было указано выше, для получения таких характеристик исследуемых структур, как энергетический спектр и распределение электростатического потенциала, используется решение уравнений Шрёдингера и Пуассона. Для многозонных моделей используется решение системы уравнений шрёдингеровского типа, построенной на $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -гамильтониане. Поскольку вид потенциала и распределения концентрации носителей заряда в многослойных структурах является достаточно сложным, данные уравнения не могут быть решены аналитически. В данной работе проводится их численное решение. В литературе используется несколько численных схем для решения уравнений Шрёдингера и Пуассона:

- Методы с дискретизацией координатного пространства
 - Метод конечных разностей [79]
 - Метод конечных объёмов [80]
 - Метод конечных элементов [81]
- Методы, использующие разложение в ряд Фурье [82]

Методы с дискретизацией в координатном пространстве предполагают, что на области решения уравнений существует набор дискретных точек или ячеек $\vec{r}_i$. Искомая функция $f(\vec{r})$ заменяется набором значений на данных ячейках $f(\vec{r}_i)$. Различие методов сводится к представлению дискретного вида искомой функции и способа задания связей между ячейками. В методе конечных разностей функция определяется на узлах конечно-разностной сетки, а связи описываются конечно-разностными формулами для производных $\partial f / \partial x$, $\partial^2 f / \partial x^2$ и т.д., входящих в уравнения [79]. В методе конечных объёмов функция также определяется на узлах сетки. При этом вокруг узлов определены поверхности раздела, и связи между узлами с точностью до множителя описываются уравнениями непрерывности потока градиента решения $\iint \vec{\nabla} f d\vec{S}$. В методе конечных элементов одна дискретная ячейка может содержать несколько узлов и параметров функции, определяющих решение [81]. При этом в зависимости от типа используемых элементов связи между ячейками описываются при помощи уравнений на непрерывность решения и/или его градиента $\vec{\nabla} f(\vec{r})$ [80]. Следует заметить, что в предельном случае равномерной сетки с постоянным размером шага методы конечных объёмов и конечных разностей оказываются эквивалентными.

Методы, использующие разложение решения в ряд Фурье предполагают, что решение на рассматриваемой области $x \in [0 : L]$ представляется в виде тригонометрической суммы $f(x) = \sum_n^N C_n \sin(\pi nx/L)$. В этом случае решение ищется в виде набора из N констант C_n , соответствующих интенсивностям соответствующих гармоник. В работе [82] показано, что точность данного метода решения сопоставима с соответствующей по вычислительной сложности реализации метода конечных разностей.

1.4.1 Изучение вольт-фарадных характеристик и профилей наблюдаемой концентрации носителей в гетероструктурах $A^{III}B^V$

Для диагностики полупроводниковых структур широко используются различные методы, основанные на изменении ёмкости при напряжении смещения, приложенном к структуре. При помощи данных методов производятся измерения таких параметров и характеристик структур, как энергетические разрывы на гетерограницах, профили концентрации легирующих примесей и носителей заряда.

Метод вольт-фарадных измерений является одним из наиболее распространённых неразрушающих методов контроля и исследования полупроводниковых структур и приборов [7]. Совместно с экспериментальными измерениями также существует ряд методов численного моделирования вольт-фарадных характеристик (ВФХ) для осуществления процессов проектирования структур и их диагностики [5]. Однако практически все исследования с применением подобных моделей проводились для структур с гетеропереходами и квантовыми ямами [5–7]. При этом в литературе крайне мало данных о расчётах вольт-фарадных характеристик и профилей концентрации для структур, содержащих дельта-легированные слои, хотя информация о подобных зависимостях важна при создании многих приборов. Известно, что дельта-легирование используется для управления высотой потенциального барьера в диодах Шоттки, для создания магнитных полупроводников и в НЕМТ-транзисторах, работающих при терагерцовых частотах, позволяя увеличить концентрацию носителей без уменьшения подвижности [83].

Таким образом, процесс диагностики структур со сложным профилем состава является необходимой задачей, при этом часто осложняется существенными систематическими погрешностями моделей, описывающих вольт-фарадные зависимости. Простейшей подобной моделью является приближение обеднённого слоя [1, 7]. Для объяснения сути данного приближения будем рассматривать полупроводник n -типа, находящийся под напряжением смещения U , в результате чего в его объёме образуется слой, обеднённый носителями заряда. Плотность объёмного заряда в нём будет определяться концентрацией ионизованных атомов примесей:

$$\rho = q (N_d(x) - N_a(x)) . \quad (1.13)$$

При изменении напряжения смещения на структуре на величину dU толщина области обеднения w возрастёт на dx , увеличение объёмного заряда составит:

$$dQ = q (N_d(x) - N_a(x)) dx. \quad (1.14)$$

Отсюда несложно показать, что дифференциальная ёмкость слоя объёмного заряда будет определяться, как

$$C = \frac{\partial Q}{\partial U} = S \frac{\varepsilon \varepsilon_0}{w}. \quad (1.15)$$

Путём дифференцирования обратного квадрата ёмкости по напряжению с учётом выражений (1.13), (1.14) и (1.15) получим выражения для определения профиля легирования:

$$N_d(x) - N_a(x) = \frac{2}{e \varepsilon \varepsilon_0 S^2} \left(\frac{d}{dU} \left(\frac{1}{C} \right)^2 \right)^{-1} \quad (1.16)$$

где

$$x = S \varepsilon \varepsilon_0 \frac{1}{C}. \quad (1.17)$$

Данная модель получила дальнейшее развитие [84] с распространением на такие системы, как гетеропереходы. При рассмотрении систем с известным профилем легирования и наличием одного гетероперехода было показано, что получаемый из ВФХ профиль при помощи выражений (1.16) и (1.17) не соответствует истинному профилю распределения носителей заряда либо легирующих примесей. Полученную таким образом величину принято называть «наблюдаемым» (англ. apparent) профилем концентрации. Тем не менее, полный заряд и его первый момент, выражаемые наблюдаемым профилем концентрации соответствуют истинному:

$$\begin{aligned} \int_X n^*(x) dx &= \int_X n(x) dx, \\ \int_X n^*(x) x dx &= \int_X n(x) x dx. \end{aligned} \quad (1.18)$$

С учётом (1.18), интегрируя уравнение Пуассона можно получить:

$$\frac{e}{\varepsilon \varepsilon_0} \int_X (N_d(x) - n^*(x)) (x - x_0) dx = \frac{k_B T}{e} \ln \left(\frac{n(\infty) N_C(0)}{n(0) N_C(\infty)} \right) + \frac{\Delta E_C}{e}, \quad (1.19)$$

откуда может быть выражена величина разрыва зон ΔE_C .

Упрощение процесса диагностики возможно путём математического моделирования вольт-фарадных характеристик. Существует ряд моделей, позволяющих с той или иной степенью точности объяснять особенности получаемых ВФХ. В частности, в работе Летартре [4] рассматривалась одна из первых численных моделирования ВФХ структур.

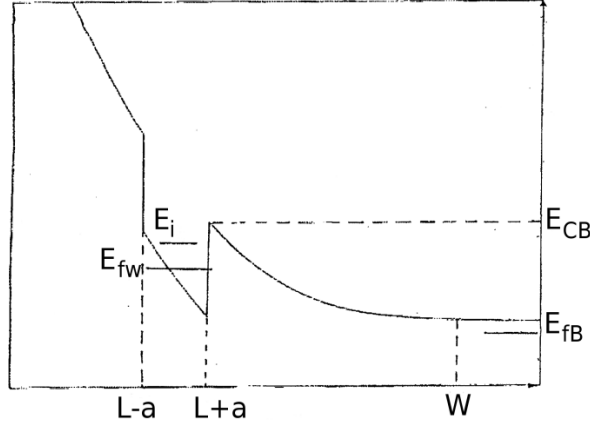


Рис. 1.10. Зонная диаграмма структуры, рассматриваемой при моделировании вольт-фарадных характеристик согласно модели Летартре [4]

В этой модели рассматривалась система, содержащая квантовую яму шириной $2a$, расположенную на расстоянии L от контакта Шоттки. В результате изгиба зон от приложенного напряжения яма оказывается внутри обеднённого слоя толщиной W (см. рис. 1.10). В пренебрежении координатной зависимостью концентрации внутри ямы выражение для полного заряда обеднённого слоя:

$$Q = Se(N_d W - n_w), \quad (1.20)$$

где n_w — концентрация носителей в яме, определяемая как

$$n_w = 2n_{2D} \sum_i (\ln(1 + \exp u_i) - u_i), \quad (1.21)$$

где

$$u_i = \frac{E_i - E_{FW}}{k_B T} \quad (1.22)$$

и

$$n_{2D} = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2}. \quad (1.23)$$

В результате интегрирования уравнения получается связь ширины обеднённого слоя с приложенным напряжением:

$$V = -\frac{eN_d W^2}{2\varepsilon\varepsilon_0} + \frac{en_w L}{\varepsilon\varepsilon_0}. \quad (1.24)$$

Путём дифференцирования (1.20) и (1.24) может быть получено выражение для ёмкости:

$$C = \varepsilon\varepsilon_0 S \frac{1 + \alpha \frac{W-L}{a}}{W + \alpha \frac{W-L}{a} L}, \quad (1.25)$$

где

$$\alpha = \frac{2n_{2D} \sum_i \frac{1}{1+\exp u_i} \frac{e^2 a}{\varepsilon\varepsilon_0}}{1 - 2n_{2D} \sum_i \frac{1}{1+\exp u_i} \frac{e^2 a}{4\varepsilon\varepsilon_0}}. \quad (1.26)$$

Для получения значения ёмкости в вышеупомянутой работе [4] применялся следующий алгоритм:

1. Для заданного значения напряжения смещения V выбиралось некоторое значение n_w
2. Вычислялась ширина барьера W согласно выражению 1.24
3. Уровни размерного квантования E_i вычислялись исходя из прямоугольного вида потенциала со смещением, полученным из решения уравнения Пуассона (см. рис. 1.10), после чего процесс повторялся до достижения сходимости

Несмотря на большое количество упрощений, таких, как пренебрежение пространственной зависимостью концентрации внутри ямы, пренебрежение вкладом концентрации носителей заряда в КЯ в вид потенциала, оказалось возможным получить достаточно хорошее согласие с экспериментом (рис. 1.11). Тем не менее, расчёты с применением данной модели не позволяют объяснять и моделировать свойства структур, содержащих более одной КЯ, δ -легированные слои, КЯ, имеющие непрямоугольный профиль в рамках моделей учёта сегрегации и пр. Для моделирования более сложных структур возможно применение процедуры численного решения уравнений, описывающих профили потенциала и концентрации носителей в КЯ и δ -легированных слоях.

В рамках приближения эффективной массы с использованием различных численных методов задача о моделировании ВФХ структур, содержащих КЯ, решалась путём численного решения системы, состоящей из стационарного одномерного одноэлектронного уравнения Шрёдингера в приближении эффективной массы и уравнения Пуассона [5–7]. В частности, в работе [6] производилось моделирование в приближении полного разделения носителей заряда на

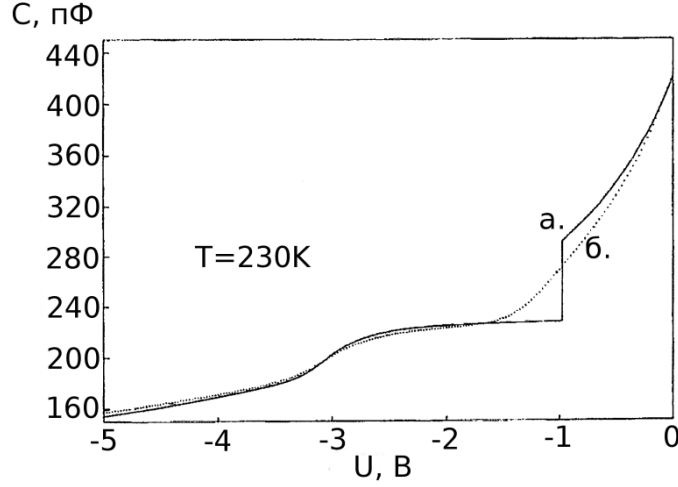


Рис. 1.11. Вольт-фарадная характеристика, полученная по модели Летартре (а.) и по соответствующим экспериментальным данным (б.)

связанные в квантовых ямах и свободные, что отражалось на выражении для концентрации носителей:

$$n(x) = n_{2D}(x) + n_{3D}(x), \quad (1.27)$$

где n_{2D} — концентрация носителей на уровнях размерного квантования; n_{3D} — концентрация свободных носителей.

Для получения решения системы уравнений Шрёдингера и Пуассона в рассматриваемой работе использовался т.н. метод релаксационного множителя [85], поскольку прямая подстановка решений в этой системе уравнений ведёт к расходимости. Суть метода состоит в использовании в качестве входного потенциала уравнения Шрёдингера линейной комбинации вида:

$$V(x) = \Delta E_C(x) + \omega \Phi^{(n)}(x) + (1 - \omega) \Phi^{(n-1)}(x), \quad (1.28)$$

где $\Phi^{(n)}(x)$ — электростатический потенциал, полученный на итерации n ; ω — релаксационный множитель.

Однако для структур, в которых потенциал значительно отличается от прямоугольного. Данный факт особенно проявляется в состояниях, соответствующих большому приложенному напряжению из-за высокого вклада в концентрацию носителей заряда на квазиуровнях разделение (1.27) оказывается неприменимым. В работах [5, 7] для решения этой проблемы использовалась аппроксимация непрерывного энергетического спектра дискретным с высокой плотностью уровней, причём было показано, что для моделирования структур, содержащих квантовые ямы

достаточен учёт первых 16 уровней такого аппроксимированного спектра. Однако в вышеупомянутых работах не были затронуты вопросы моделирования δ -легированных слоёв в составе рассматриваемых структур.

В настоящей работе было обнаружено, что для моделирования таких структур необходимо использование большего числа аппроксимированных уровней, также необходимы ограничения, накладываемые на их количество, связанные как с физической трактовкой данного приближения, так и с ограничениями численного метода. Тем не менее, показано, что данный метод может успешно использоваться для моделирования структур, содержащих δ -легированные слои. Также показано, что для структур, содержащих δ -легированные слои, не удаётся добиться сходимости решения системы уравнений Шрёдингера и Пуассона с использованием метода, описываемого выражением (1.28), в связи с чем применялся метод ньютоновской линеаризации [86, 87]. Более подробно данные вопросы рассмотрены в Главе 2.

1.5 Спин-орбитальное взаимодействие в структурах с размерным квантованием

Большинство спин-зависимых явлений в полупроводниковых системах с одномерным квантовым ограничением вызваны спиновым расщеплением энергетического спектра носителей в отсутствие магнитного поля [88, 89]. В большинстве полупроводниковых гетероструктур с КЯ данное расщепление электронных состояний вблизи дна зоны проводимости линейно по квазиимпульсу.

Для того чтобы два спиновых состояния частицы с одним и тем же волновым вектором $\vec{k}$ в плоскости структуры имели разную энергию в отсутствие магнитного поля, необходимо отсутствие центра инверсии в системе. Существует две наиболее известных причины, по которым 2D-системы не обладают центром пространственной инверсии. Первая — его отсутствие в объёмных материалах, из которых выращена гетероструктура. Эта объёмно-инверсионная асимметрия (англ. Bulk Inversion Asymmetry, BIA) имеет место в полупроводниковых соединениях $A^{III}B^V$, $A^{II}B^{VI}$, у полупроводников IV группы Si и Ge. Двумерные системы, выращенные из материалов с BIA, также не обладают центром инверсии и, следовательно, спиновое вырождение в спектре носителей в них снимается. Второй причиной отсутствия центра инверсии в гетероструктурах является структурно-инверсионная асимметрия (англ. Structure Inversion Asymmetry, SIA). Она заключается в отсутствии макроскопической симметрии структуры (неэквивалентность в направлении вдоль и против оси роста). Это может быть вызвано несимметричным расположением барьерных слоёв около КЯ или присутствием электрического поля, приложенного в попе-

речном направлении плоскости гетероструктуры. SIA может иметь место в гетероструктурах, выращенных из любых полупроводниковых материалов. Эффективный гамильтониан для электронов вблизи дна зоны проводимости в гетероструктурах без центра инверсии имеет вид:

$$\hat{H} = \hat{T}(z, \vec{k}) + U(z) + \hat{H}_{\text{SO}}(\vec{k}), \quad (1.29)$$

где $\hat{T}(z, \vec{k})$ и $U(z)$ — оператор кинетической энергии (квадратичный по k) и гетеропотенциал в зависимости от координаты вдоль оси роста z соответственно, а $\hat{H}_{\text{SO}}(\vec{k})$ — оператор СОВ в зависимости от параметров спина и импульса. Из инвариантности системы по отношению к инверсии времени, а, также, из соображений симметрии, можно показать, что данный оператор СОВ имеет вид:

$$\hat{H}_{\text{SIA}} = \alpha (\hat{\sigma}_x k_y - \hat{\sigma}_y k_x) = \alpha \left(\hat{\vec{\sigma}} \times \vec{k} \right)_z. \quad (1.30)$$

Данный вид гамильтониана впервые был предложен Э.И. Рашба [90] для объёмных полупроводников со структурой вюрцита, имеющих винтовую ось (направление z). Позднее в ряде работ [91] [92] было отмечено, что SIA в системах с одномерным квантовым ограничением приводит к спин-орбитальному взаимодействию такого же вида.

С точностью до членов 3-его порядка по волновому вектору электронный гамильтониан вблизи дна зоны проводимости объёмного кристалла со структурой цинковой обманки имеет вид [93]:

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{\sigma}_0 + \gamma_D (\kappa_x \hat{\sigma}_x + \kappa_y \hat{\sigma}_y + \kappa_z \hat{\sigma}_z), \quad (1.31)$$

где $\kappa_x = k_x(k_y^2 - k_z^2)$, $\kappa_y = k_y(k_z^2 - k_x^2)$ и $\kappa_z = k_z(k_x^2 - k_y^2)$.

Усредняя по направлению роста, и учитывая размерное квантование, получим СОВ типа ВИА [93]:

$$\hat{H}_{\text{BIA}}(\vec{k}) = \beta (\hat{\sigma}_x k_x - \hat{\sigma}_y k_y). \quad (1.32)$$

данный тип СОВ впервые был получен в работе Дрессельхауза [93].

Как можно видеть, слагаемое гамильтониана, отвечающее СОВ, можно записать в обобщённом виде:

$$\hat{H}_{\text{SO}}(\vec{k}) = \sum_{l,m} \beta_{lm} \hat{\sigma}_l k_m. \quad (1.33)$$

Данный гамильтониан представим в виде:

$$\hat{H}_{\text{SO}}(\vec{k}) = \hbar \hat{\sigma} \vec{\Omega}(\vec{k}), \quad (1.34)$$

где компоненты вектора $\vec{\Omega}$ записываются, как $\Omega_l = \beta_{lm} k_m / \hbar$.

Гамильтониан (1.34) имеет вид, подобный гамильтониану, описывающего взаимодействие Зеемана. Таким образом, вектор $\vec{\Omega}$ имеет смысл частоты спиновой прецессии в «эффективном магнитном поле», действующем на спины электронов с волновым вектором $\vec{k}$. Векторное поле частоты прецессии является существенно анизотропным, а его качественный вид зависит от соотношения параметров СОВ Рашба и Дрессельхауза α и β (см. рис.1.12). Существует экспериментальная методика [89], позволяющая проводить измерения соотношения параметров α и β вместе с эффективным магнитным полем $\vec{\Omega}$. Методика основана на анализе анизотропии углового распределения фототока, вызванной спин-гальваническим эффектом.

Рис. 1.12

В работе [84] было установлено, что при некоторых соотношениях параметров СОВ Рашба и Дрессельхауза для определённых кристаллографических направлений оси роста структуры возникает особый режим спиновой прецессии, называемый устойчивым спиновым хеликсом [94]. Данный режим характеризуется появлением дополнительной симметрии и соответствующего ей интеграла движения. При этом угол спиновой прецессии движущейся частицы линейно зависит от пространственных координат (рис. 1.13а.), в то время как в обычном состоянии угол спиновой прецессии имеет произвольный вид без трансляционной симметрии (рис. 1.13б.). В частном случае в структурах с направлением роста [100] режим спинового хеликса соответствует равенству модулей параметров СОВ Рашба и Дрессельхауза.

Необходимо заметить, что использование приближения эффективной массы путём решения уравнения Шрёдингера (1.5) не позволяет описать ряда физических эффектов, связанных со спин-орбитальным взаимодействием (СОВ), а также вырождением и взаимодействием зон, проявляющимся в виде нарушения параболичности закона дисперсии $E(\vec{k})$. Для корректного описания спектра размерного квантования гетероструктур и связанных с ним характеристик в работе используется приближение огибающей в рамках $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -метода [39] [95]. Использование данного приближения можно представить как обобщение метода эффективной массы с гамильтонианом, имеющим вид матрицы порядка m . Число m отвечает количеству учтённых в приближении энергетических зон полупроводника. В литературе рассматриваются различные приближения, использующие 8, 14 и более зон [11] [12] [13] [14]. Огибающая волновой функции (ВФ) при этом является m -компонентным вектором, зависящим от компонент волнового вектора, со-

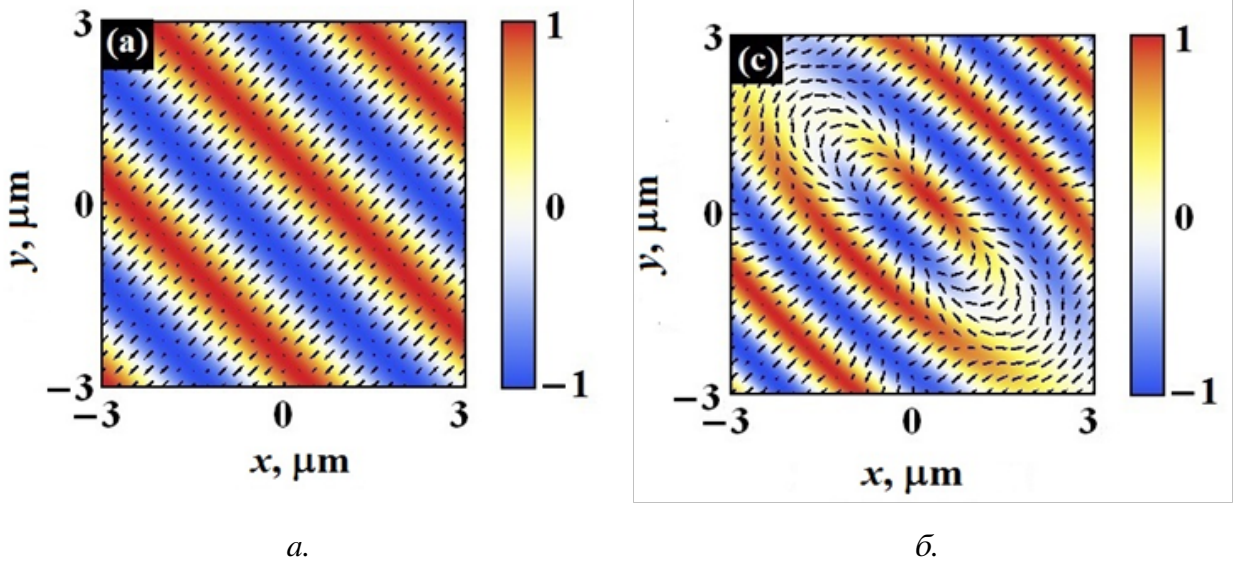


Рис. 1.13. Распределение спиновой плотности системы с одномерным квантовым ограничением (направление роста [001]) в режиме спинового хеликса (а.) и для состояния общего вида (б.) [84]

ответствующих квазисвободному движению. В качестве примера ниже записано шрёдингеровское уравнение для $m = 2$:

$$\begin{pmatrix} E_C + \tilde{A} \frac{\partial^2}{\partial z^2} & i\tilde{P}k \\ -i\tilde{P}k & E_V + \tilde{L} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \psi_1(k_y, k_z) \\ \psi_2(k_y, k_z) \end{pmatrix} = E_{n,k_y,k_z} \times \begin{pmatrix} \psi_1(k_y, k_z) \\ \psi_2(k_y, k_z) \end{pmatrix} \quad (1.35)$$

Таким образом, численный расчёт спинового расщепления и связанных с ним характеристик может быть осуществлён на основе $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -приближения с учётом оператора СОВ. На рис. 1.14 показан полученный численно вид дисперсионных кривых E_{n,k_y,k_z} и покомпонентной суммы квадратов огибающих ВФ в минимуме основной долины ($k_y = k_z = 0$) для квантовой ямы на основе $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ /GaSb.

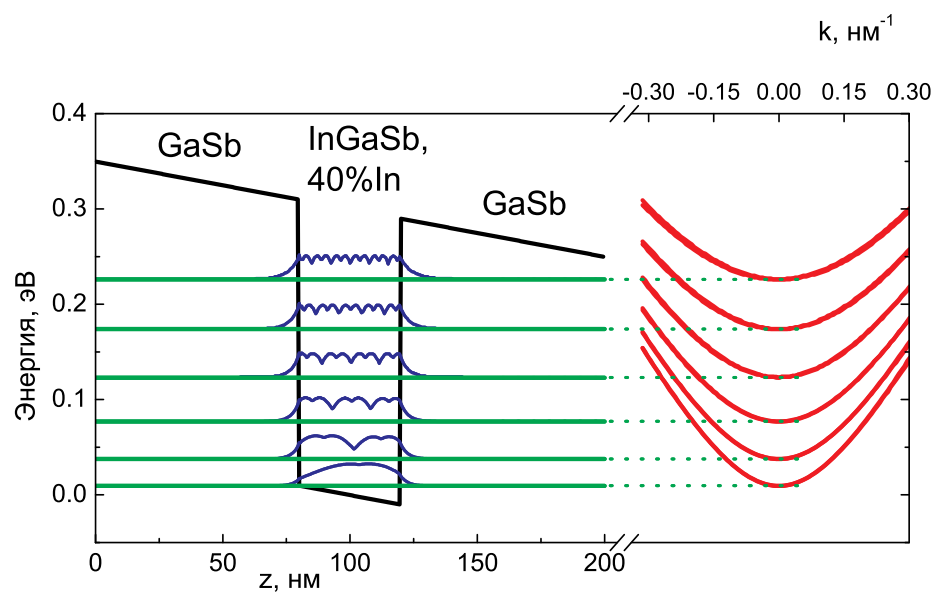


Рис. 1.14. Энергетический спектр размерного квантования для $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}/\text{GaSb}$ КЯ: пространственное распределение квадрата покомпонентной суммы квадрата огибающих ВФ в точке Г (слева) вместе с положениями уровней дискретного спектра, а также соответствующие им дисперсионные кривые (справа)

Глава 2

Моделирование оптических и вольт-фарадных характеристик гетероструктур $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, содержащих квантовые ямы и δ -легированные слои

2.1 Постановка задачи

Гетероструктуры с квантовыми ямами (КЯ) на основе материалов $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ вызывают значительный интерес благодаря широким возможностям их применения, к которым относятся, в частности, источники излучения среднего и дальнего ИК-диапазона, транзисторы с высокой подвижностью носителей заряда (НЕМТ). Принцип действия оптических излучающих приборов с КЯ основан как на межзонных, так и на межподзонных переходах [96].

Известно, что для оптических приборов с КЯ, варьируя параметры роста и геометрию гетероструктуры, возможно управлять как вероятностями межподзонных переходов, так и транспортными и энергетическими характеристиками системы в целом [97].

Кроме оптических свойств, низкоразмерные структуры обладают особыми транспортными характеристиками. Ввиду высокой подвижности данные структуры используются для создания сверхвысокочастотных (рабочие частоты до 100 ГГц) полевых транзисторов. Кроме того, они являются перспективными для создания детекторов и генераторов электромагнитного излучения в терагерцовом диапазоне. В большинстве случаев для обеспечения квантовых ям но-

сителями применяется дельта легирование. Дельта-легирование представляет собой введение легирующей примеси в пределах нескольких атомных слоёв [44] (рис. 2.2), приводящего к заметному искажению электростатического потенциала и профиля концентрации носителей. Получаемые таким образом структуры отличает высокая подвижность носителей заряда в КЯ [98].

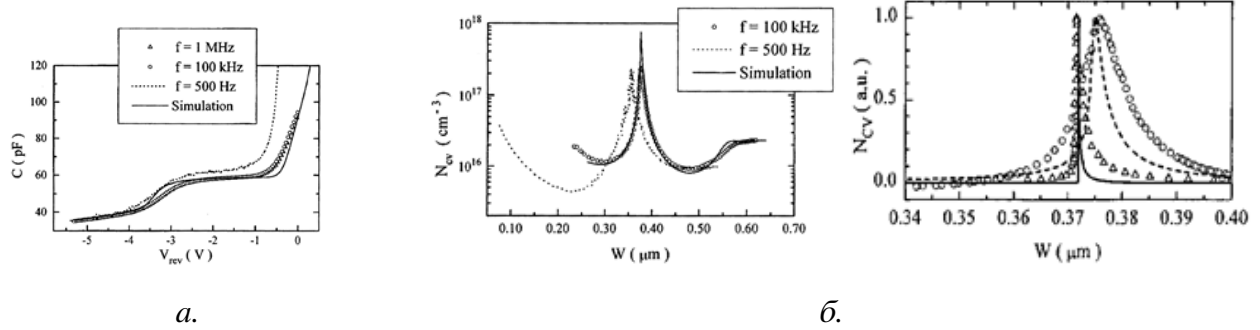


Рис. 2.1. Вольт-фарадные характеристики (а.) и наблюдаемые профили концентрации (б.) одиночной КЯ из литературных данных [6].

Метод вольт-фарадных измерений является одним из наиболее распространённых неразрушающих методов контроля и исследования полупроводниковых структур и приборов. Он используется для определения разрыва зон на гетерограницах, распределения носителей заряда в структурах, пространственного положения КЯ, профилей концентрации легирующей примеси [99]. Экспериментально вольт-фарадные характеристики (ВФХ) измеряются методами ёмкостной спектроскопии [100]. Из анализа вольт-фарадных характеристик получают так называемые профили наблюдаемой концентрации (англ. apparent carrier concentration [6, 7], которые характеризуют распределение зарядовой плотности в окрестности квантовой ямы. Однако профили концентрации, полученные данным способом, зачастую сложно интерпретировать, поскольку они содержат вклад от различных слоёв структуры, зависят от различных факторов роста. следовательно требуют дополнительного анализа. Поэтому численный подход при моделировании вольт-фарадных характеристик и их дальнейший анализ позволяет проводить более корректные исследования данных гетероструктур.

В литературе существует достаточно много работ, посвящённых методам численного моделирования вольт-фарадных характеристик структур с целью их диагностики. В частности, большой объём исследований с применением подобных моделей проводился для структур, содержащих гетеропереходы и одиночные квантовые ямы [5–7]. Однако при этом весьма слабо изучен вопрос о расчётах вольт-фарадных характеристик и профилей концентрации для структур, содержащих один или несколько дельта-легированных слоёв, которые необходимы при со-

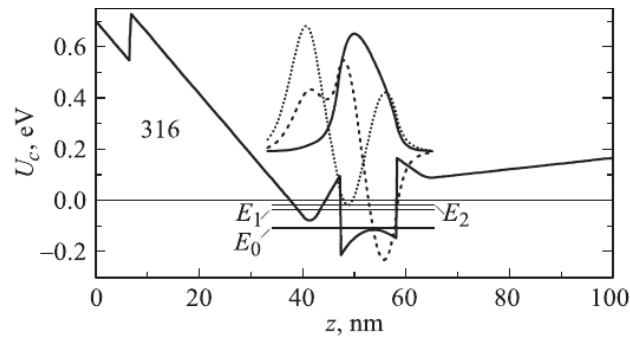


Рис. 2.2. Зонная диаграмма структуры с δ -слоем и КЯ [25]

здании многих приборов нанoeлектроники. Известно, что дельта-легирование используется для управления высотой потенциального барьера в диодах Шоттки, для создания магнитных полупроводников и в НЕМТ-транзисторах, работающих при терагерцовых частотах [101].

Поскольку создание качественных структур подобного типа является дорогостоящим и трудоёмким процессом, важными остаются проблемы предварительного численного расчёта параметров приборов с данными структурами и диагностики уже созданных приборов. Отличительной особенностью квантово-размерных систем (к которым относятся гетероструктуры) является более яркая выраженность квантовых эффектов, таких, как появление дискретного энергетического спектра, проявление соотношения неопределённостей и т.п. Описание квантовых состояний в гетероструктурах реализуется при помощи совместного решения стационарного одномерного одноэлектронного уравнения Шрёдингера/Пуассона в приближении эффективной массы.

Известно, что при непосредственной реализации согласованного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона в условиях приложенного напряжения или сильного искажения электростатического потенциала существуют определённые трудности в расчётах различных характеристик. Усовершенствование данной методики для вычисления и исследования энергетических и вольт-фарадных характеристик в сложных гетероструктурах, в т.ч. содержащих дельта-легированные слои являлось одной из задач данной работы. Также нашей задачей являлось исследование влияния технологических параметров роста, в т.ч. эффекта сегрегации на характеристики структур для различных профилей состава. при различном взаимном расположении квантовых ям и дельта-слоёв. Таким образом, в данной работе при помощи численного моделирования рассчитываются профили потенциала, такие энергетические характеристики, как уровни размерного квантования, волновые функции для гетероструктур с различным профилем состава. Рассчитаны вольт-фарадные характеристики структур, содержащие как одиночные квантовые ямы, одиночные дельта слои, так сочетания близко расположенных квантовой ямы и

дельта-слоя.

2.2 Приближение эффективной массы для расчёта энергетического спектра квантовых ям

В общем виде уравнение Шрёдингера в приближении эффективной массы для одной долины может быть записано в следующем виде:

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}) = \left(\sum_{i,j} \hat{p}_i w_{i,j}(\vec{r}) \hat{p}_j + V(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}), \quad (2.1)$$

где $w_{i,j}(\vec{r})$ – тензор обратной эффективной массы, $\Psi(\vec{r})$ – плавная огибающая волновой функции (ВФ), $V(\vec{r})$ – потенциальная энергия, определяемая разрывом зон и распределением электростатического потенциала: $V(\vec{r}) = \Delta E_C(\vec{r}) - e\varphi(\vec{r})$.

Оператор импульса $\hat{p}_i$ в используемом в работе координатном представлении в отсутствие магнитного поля имеет вид $\hat{p}_j = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial x_j}$. Тогда первое слагаемое левой части (2.1), обусловленное действием оператора кинетической энергии $\hat{T}$ имеет вид

$$\hat{T}\Psi(\vec{r}) = \sum_{i,j} \hat{p}_i w_{i,j}(\vec{r}) \hat{p}_j \Psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_i} w_{i,j}(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x_j} \Psi(\vec{r}). \quad (2.2)$$

Распределение электростатического потенциала определяется уравнением Пуассона, решаемым совместно с уравнением Шрёдингера:

$$\sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_i} \varepsilon(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x_j} \varphi(\vec{r}) = -\frac{\rho(\vec{r})}{\varepsilon_0} = -\frac{e}{\varepsilon_0} (p(\vec{r}) - n(\vec{r}) + N_d(\vec{r})), \quad (2.3)$$

где n, p, N_d – концентрации электронов, дырок и ионизованных примесей соответственно. Система из уравнений Шрёдингера и Пуассона не может быть решена аналитически в общем виде и в данной работе производится её численное решение.

В зависимости от размерности квантового ограничения рассматриваемых структур потенциальная энергия V может быть сведена к функции одной (квантовые ямы, КЯ) или двух (квантовые нити, «нанопроволоки») координат. Квантование по всем трём пространственным осям соответствует случаю квантовой точки.

Далее будет рассматриваться случай одномерного квантового ограничения, в главе 3 рассматривается случай двумерного квантового ограничения в применении к полупроводниковым нанопроволокам и нанотрубкам.

Рассмотрим частный случай (2.1), при котором $V(\vec{r}) = V(z)$, т.е. направление квантования для структуры КЯ соответствует направлению оси z . Будем искать решение (2.1) в виде произведения следующего вида:

$$\Psi(\vec{r}) = \exp(ik_x x + ik_y y) \psi(z). \quad (2.4)$$

В этом случае, согласно Штерну и Говарду [3], решение для случая независимой от координаты эффективной массы сводится к решению одномерного уравнения Шрёдингера на множестве ВФ $\psi(z)$, соответствующий размерному квантованию:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} w_{zz} \frac{\partial}{\partial z} + V(z) \right) \psi(z) = E_\alpha \psi(z), \quad (2.5)$$

где α — номер подзоны размерного квантования, а E_α называют энергией размерного квантования.

При этом полная энергия системы и решение (2.1) записывается в виде суммы энергии квантования и свободного движения:

$$E = E_\alpha + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i,j=1}^2 w'_{i,j} k_i k_j, \quad (2.6)$$

где $w'_{i,j}$ определяются как [3]:

$$\begin{aligned} w'_{xx} &= w_{xx} - \frac{w_{xz}^2}{w_{zz}}, \\ w'_{yy} &= w_{yy} - \frac{w_{yz}^2}{w_{zz}}, \\ w'_{xy} &= w_{xy} - \frac{w_{xz} w_{yz}}{w_{zz}}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Также можно заметить, что в рассматриваемом случае одномерной задачи уравнение Пуассона (2.3) записывается в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial z} \varepsilon(z) \frac{\partial}{\partial z} \varphi(z) = -\frac{\rho(z)}{\varepsilon_0}. \quad (2.8)$$

2.3 Численное решение задачи о спектре квантовых ям в приближении эффективной массы

2.3.1 Дискретизация уравнений Шрёдингера и Пуассона в координатном пространстве

Задача о нахождении спектра квантовой ямы фактически сводится к решению уравнения (2.5) совместно с (2.8).

Рассмотрим действие одномерного оператора кинетической энергии $\hat{T}(w) = \frac{\partial}{\partial z} w(z) \frac{\partial}{\partial z}$, используемого в левой части как уравнения Шрёдингера (2.5), так и уравнения Пуассона (2.8) на некоторую функцию координаты $f(z)$:

$$\hat{T}(w)f(z) = \frac{\partial}{\partial z} w(z) \frac{\partial}{\partial z} f(z) = g(z). \quad (2.9)$$

Ограничим весь объём пространства рядом параллельных плоскостей $z = z_i$ (см. рис. 2.3), проходящих через равные интервалы a_z и делящих пространство на ряд дискретных ячеек. Проинтегрировав по объёму i -й ячейки выражение (2.9) получим с учётом теоремы Остроградского-Гаусса:

$$\oint_S w(z) \vec{\nabla} f(z) d\vec{S} = \iiint_V g(z) dV, \quad (2.10)$$

где S , V – поверхность и объём ячейки соответственно.

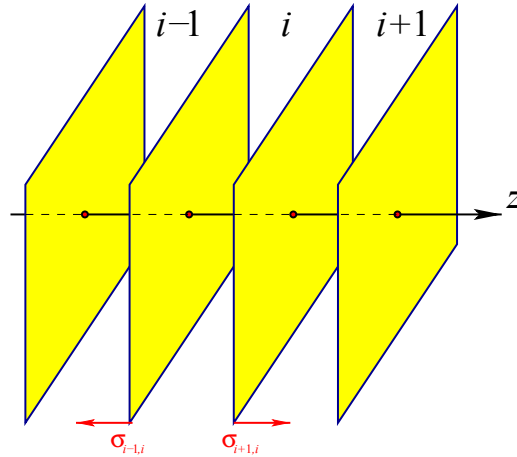


Рис. 2.3. Схема ячеек для дискретизации одномерной задачи

Левая часть (2.10) представляет из себя поток векторного поля $w(z) \vec{\nabla} f(z)$. Для уравнения Шрёдингера она соответствует потоку скорости, для уравнения Пуассона — потоку элек-

трического поля. Поскольку рассматривается одномерная задача, поток рассматриваемого векторного поля через боковую поверхность ячейки равен нулю, и поток представим в виде суммы производных функции на левой и правой границах ячейки:

$$\oint_S w(z) \vec{\nabla} f(z) d\vec{S} = \sigma \left(w(z) \frac{\partial f(z)}{\partial z} \Big|_{z=z_{i,i+1}} - w(z) \frac{\partial f(z)}{\partial z} \Big|_{z=z_{i-1,i}} \right), \quad (2.11)$$

где σ — площадь боковой поверхности ячейки, z_i — координата середины i -й ячейки, $z_{i+1,i} = (z_{i+1} + z_i)/2$ — координата границы раздела между ячейками с индексами i и $i+1$.

Можно заметить, что при устремлении длины ячейки a_z к нулю правая часть (2.10) обращается в нуль и при подстановке в (2.11) величин для уравнения Шрёдингера ($f(z) = \psi(z)$, $w(z) = 1/m(z)$) образуются граничные условия Бастарда [102]:

$$\frac{1}{m(z)} \frac{\partial \psi(z)}{\partial z} \Big|_{z=z_i+\delta} = \frac{1}{m(z)} \frac{\partial \psi(z)}{\partial z} \Big|_{z=z_i-\delta}, \quad (2.12)$$

где $\delta \rightarrow 0$.

При малом изменении $f(z)$ и $g(z)$ в пределах ячейки производные выражения (2.11) преобразуются в конечные разности, в то время как объёмный интеграл сводится к произведению значения функции $g(z)$ на объём ячейки $V = \sigma a_z$:

$$\begin{aligned} \oint_S w(z) \vec{\nabla} f(z) d\vec{S} &\approx \sigma \left(w_{i,i+1} \frac{f(z_{i+1}) - f(z_i)}{a_z} - w_{i-1,i} \frac{f(z_i) - f(z_{i-1})}{a_z} \right), \\ \iiint_V g(z) dV &\approx \sigma a_z g(z_i), \end{aligned} \quad (2.13)$$

Подставляя (2.13) в (2.10), получим:

$$\sum_j T_{i,j}(w) f(z_j) = g(z_i), \quad (2.14)$$

где

$$T_{i,j}(w) = \frac{1}{a_z^2} (w_{i,i+1} (\delta_{i+1,j} - \delta_{i,j}) - w_{i-1,i} (\delta_{i,j} - \delta_{i-1,j})), \quad (2.15)$$

где $\delta_{i,j}$ — символ Кронекера.

Таким образом, действие оператора кинетической энергии при переходе к дискретной конечно-разностной схеме может быть представлено как умножение дискретного вектора $f(z_i)$ на матрицу $T_{i,j}(w)$. Запишем (2.15) в матричном виде:

$$T_{i,j}(w) = \frac{1}{a_z^2} \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ \cdots & -w_{2,3} - w_{1,2} & w_{2,3} & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & w_{2,3} & -w_{3,4} - w_{2,3} & w_{3,4} & 0 & \cdots \\ \cdots & 0 & w_{3,4} & -w_{4,5} - w_{3,4} & w_{4,5} & \cdots \\ \cdots & 0 & 0 & w_{4,5} & -w_{5,6} - w_{4,5} & \cdots \\ \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Как можно видеть, в приближении эффективной массы для одномерного квантового ограничения матрица оператора кинетической энергии в дискретном виде имеет трёхдиагональный вид.

Рассмотрим решение одномерного уравнения Шрёдингера (2.5) с данной схемы дискретизации. Очевидно, что первое слагаемое левой части уравнения может быть представлено в виде матрицы (2.15), в то время как действие оператора потенциальной энергии представимо как умножение диагональной матрицы:

$$V(z_i)\psi(z_i) = \sum_j \delta_{i,j} V(z_i)\psi(z_j). \quad (2.17)$$

Тогда с учётом (2.14), (2.15) и (2.17) получаем конечно-разностный дискретный вид уравнения (2.5):

$$\sum_j \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} T_{i,j}(w) + \delta_{i,j} V(z_i) \right) \psi(z_j) = E_\alpha \psi(z_i). \quad (2.18)$$

Как можно видеть, задача решения уравнения (2.18) является задачей на нахождение собственных векторов и собственных значений матрицы $T_{i,j}(w) + \delta_{i,j} V(z_i)$. Собственные значения данной матрицы приближённо соответствуют энергии подзон размерного квантования E_α , а i -ая компонента соответствующего собственного вектора для состояния отвечает значению ВФ $\psi(z_i)$ на подзоне с индексом α .

Применим схему дискретизации из разд. 2.3.1 к решению одномерного уравнения Пуассона (2.8). Как можно видеть, левая часть уравнения представляет собой действие ранее описанного оператора кинетической энергии с заменой обратной эффективной массы w на диэлектрическую проницаемость ε . Тогда с учётом (2.14) и (2.15) получаем конечно-разностный вид уравнения Пуассона:

$$\sum_j T_{i,j}(\varepsilon) \varphi(z_j) = -\frac{\rho(z_i)}{\varepsilon_0}. \quad (2.19)$$

Очевидно, что если $\rho(z)$ считать не зависящей от φ , то задача решения (2.19) будет соответствовать решению линейной системы с матрицей $T_{i,j}(\varepsilon)$ и вектором правой части $-\frac{\rho(z_i)}{\varepsilon_0}$. Однако, в общем случае плотность заряда $\rho(z)$ определяется решением уравнением Шрёдингера $\psi(z)$ и уравнения Шрёдингера и Пуассона являются нелинейно связанными и решаются путём последовательных итераций с подстановкой решений уравнений друг в друга. Различные способы разрешения нелинейности и организации итерационного процесса, используемые в настоящей работе, описаны в разд. 2.3.3

2.3.2 Квантовая концентрация носителей в системах с одномерным квантовым ограничением

Концентрация носителей заряда (электронов) в полупроводнике вблизи дна зоны проводимости может быть выражена следующим образом:

$$n = \int_{E_C}^{+\infty} g(E) f_0(E) dE, \quad (2.20)$$

где $g(E)$ — плотность состояний, $f_0(E)$ — распределение Ферми-Дирака.

Для систем с одномерным квантовым ограничением в приближении эффективной массы (т.е., предполагая параболические дисперсионные зависимости) плотность состояний имеет следующий вид (см. разд. 1.2.2):

$$g_{2D} = \sum_{\alpha} \Theta(E - E_{\alpha}) \frac{m_{\text{DOS}}}{\pi \hbar^2}, \quad (2.21)$$

где $\Theta(E)$ — функция Хевисайда, m_{DOS} — эффективная масса плотности состояний, E_{α} — энергия уровня размерного квантования с номером α

$$n_{2D}(z) = \sum_{\alpha} \frac{m_{\text{DOS}} k_B T}{\pi \hbar^2} \mathcal{F}_0 \left(\frac{E_{\alpha} - E_F}{k_B T} \right) |\psi_{\alpha}(z)|^2, \quad (2.22)$$

где $\mathcal{F}_0(\eta)$ — интеграл Ферми порядка 0:

$$\mathcal{F}_j(\eta) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^j d\varepsilon}{1 + \exp(\varepsilon - \eta)}, \quad (2.23)$$

где $\Gamma(x)$ — гамма-функция. Для $j = 0$ интеграл Ферми имеет аналитический вид:

$$\mathcal{F}_0(\eta) = \ln(1 + \exp \eta). \quad (2.24)$$

2.3.3 Итерационная процедура самосогласованного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона

Обобщая описанные выше уравнения, необходимо заметить, что свойства носителей в низкоразмерных системах описываются при помощи нелинейной системы уравнений Шрёдингера и Пуассона. Данная система уравнений может быть записана следующим образом:

$$\begin{cases} \hat{H}(\varphi)\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}), \\ \vec{\nabla}\varepsilon\vec{\nabla}\varphi(\vec{r}) = -\frac{\rho(\Psi)}{\varepsilon_0}. \end{cases} \quad (2.25)$$

Оператор Гамильтона в уравнении Шрёдингера зависит от электростатического потенциала, определяющего оператор потенциальной энергии. Одновременно с этим правая часть уравнения Пуассона (плотность электростатического заряда) вычисляется через выражение для квантовой концентрации (см. разд. 2.3.2). Численное решение уравнений происходит при помощи различных процедур: решения квадратной системы линейных уравнений и решения задачи о нахождении собственных векторов и значений для эрмитовой матрицы. Таким образом, решение обоих уравнений в рамках единой численной процедуры невозможно. Для получения решения (2.25) в настоящей работе используется итеративная процедура, состоящая из следующих этапов:

1. Выбор начального приближения электростатического потенциала $\varphi(\vec{r})$.
2. Решение уравнения Шрёдингера с заданным электростатическим потенциалом.
3. Обработка решения уравнения Шрёдингера, в т.ч., расчёт квантовой концентрации.
4. Решение уравнения Пуассона с заданной концентрацией электростатического заряда.
5. Обработка решения уравнения Пуассона: получение потенциала для следующей итерации решения уравнения Шрёдингера.
6. Проверка критерия сходимости. По результатам критерия происходит либо повторение процедуры с решения уравнения Шрёдингера, либо останов процедуры.

Метод релаксационных коэффициентов

Одним из методов получения самосогласованного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона является применение т.н. релаксационных множителей. Необходимость применения

подобных методов обусловлена тем фактом, что для подавляющего большинства решаемых задач при непосредственной подстановке решений уравнений (2.5) и (2.8) друг в друга возникают расходящиеся колебания решения [85]. Для гашения данных колебаний в качестве профиля потенциальной энергии для уравнения Шрёдингера используется решение, составленное из результатов для текущей и предыдущей итерациях [85, 103]:

$$V^{(n)}(z) = \Delta E_C(z) - e \left(\omega \varphi^{(n)}(z) + (1 - \omega) \varphi^{(n-1)}(z) \right), \quad (2.26)$$

где индексом n обозначена текущая итерация самосогласованного решения, соответственно, $n - 1$ отвечает решению на предыдущей итерации. Релаксационный множитель α может принимать значения в пределах 0–1, и, как правило, его значение принимают равным 0,5–0,7 [85].

В ряде работ [104, 105], включая настоящую, данная процедура успешно применяется для получения самосогласованного решения для ряда структур, содержащих КЯ. Кроме того, аналогичным образом возможно применение данного метода для систем с двумерным квантованием, т.е. для описания полупроводниковых нанопроволок и нанотрубок. Однако практическое применение данного метода показало его низкую сходимость для систем, содержащих существенное искажение профиля потенциала, в частности, структур, содержащих δ -легированные слои вплоть до невозможности получения самосогласованного решения из-за недостаточной релаксации расходящихся колебаний. В связи с этим, в настоящей работе также применяется метод [85–87], основанный на методе Ньютона, обладающий улучшенной сходимостью [85] по сравнению с методом, использующим релаксационный множитель.

Метод ньютоновской линеаризации

Рассматривая уравнение Пуассона (2.8), мы можем заметить его нелинейность, выражающуюся в сложном виде функции плотности заряда, выражающейся через решение уравнения Шрёдингера (2.5). Будем решать численно нелинейное уравнение Пуассона при помощи метода Ньютона [79]. Для этого запишем его в виде $F(z_i) = 0$, где функцию F можно представить в следующем виде:

$$F_i = \sum_j M_{i,j} \varphi(z_j) + \frac{\rho(z_i)}{\varepsilon_0} = 0. \quad (2.27)$$

Тогда для одной итерации метода Ньютона решение уравнения Пуассона (2.27) относительно поправки к решению $\delta \varphi(z_i)$ можно представить как решение линейной системы следующего вида:

$$\sum_j J_{i,j} \delta\varphi(z_j) = -F(z_i), \quad (2.28)$$

где $J_{i,j}$ — якобиан следующего вида:

$$J_{i,j} = \frac{\partial F(z_i)}{\partial \varphi(z_j)} = \frac{\partial}{\partial \varphi(z_j)} \sum_k M_{i,k} \varphi(z_k) + \frac{1}{\varepsilon_0} \frac{\partial \rho(z_i)}{\partial \varphi(z_j)}. \quad (2.29)$$

Первое слагаемое (2.29) упрощается до непосредственного значения матрицы $M_{i,j}$, поскольку $\frac{\partial \varphi(z_k)}{\partial \varphi(z_j)} = \delta_{j,k}$. Для расчёта части второго слагаемого (2.29), обусловленной квантовой концентрацией носителей используется приближение, в котором изменение положения уровней размерного квантования полагается равным изменению электростатического потенциала, т.е.:

$$\frac{\partial E_\alpha}{\partial \varphi(z)} \approx -e, \quad (2.30)$$

тогда, дифференцируя (2.22), получим:

$$\frac{\partial n_{2D}(z)}{\partial \varphi(z)} \approx - \sum_\alpha \frac{m_{\text{dos}} k_B T}{\pi \hbar^2} \frac{e}{k_B T} \mathcal{F}_{-1} \left(\frac{E_\alpha - E_F}{k_B T} \right) |\psi_\alpha(z)|^2. \quad (2.31)$$

Таким образом, подставляя (2.31) в (2.29) и решая линейную систему (2.28) совместно с дискретным уравнением Шрёдингера (2.5) возможно получить самосогласованное решение в виде набора ВФ и соответствующего им распределения электростатического потенциала.

2.3.4 Проблема нефизичных быстро осциллирующих состояний

Необходимо заметить, что вследствие использования дискретной координатной сетки, при решении уравнений полученные решения имеют ряд ограничений. В решении уравнения Шрёдингера помимо энергетического спектра, соответствующего решаемой задаче, возникают быстро осциллирующие решения, не имеющие физического смысла (см. рис. 2.4). Особое значение данная проблема приобретает для многозонных моделей (см. разд. 4.4.2). В данном разделе рассмотрены факторы и ограничения для рассмотренной выше однозонной модели (приближения эффективной массы).

Рассмотрим бесконечно большой образец полупроводника с постоянными эффективной массой и потенциальной энергией. Выберем начало отсчёта потенциальной энергии так, что постоянная потенциальная энергия $V = 0$. Будем рассматривать случай, при котором эффективная масса электрона равна массе свободного электрона, т.е. $w = 1$. Тогда, с учётом (2.15) уравнение (2.18) будет иметь вид

$$-\sum_j \frac{\hbar^2}{2m_0 a_z^2} (\delta_{i+1,j} - 2\delta_{i,j} + \delta_{i-1,j}) \psi(z_j) = E\psi(z_i). \quad (2.32)$$

Применим к волновой функции $\psi(z_i)$ рассматриваемого образца теорему Блоха:

$$\psi(z_{i\pm 1}) = \psi(z_i) \exp(\pm i k_z a_z). \quad (2.33)$$

Подставляя (2.33) в (2.32), получим дисперсионную зависимость:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m_0 a_z^2} (\exp(ik_z a_z) + \exp(-ik_z a_z) - 2) = \frac{\hbar^2}{m_0 a_z^2} (1 - \cos(k_z a_z)). \quad (2.34)$$

Рассмотрим состояния вблизи точки $k_z = 0$. Рассмотрев предел (2.34) получим $E \approx \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_0}$. Состояния вблизи $k_z = 0$ соответствуют приближённому решению исходного непрерывного уравнения Шрёдингера. Другой экстремальной точкой на дисперсионной кривой является $k_z = \frac{\pi}{a_z}$. Очевидно, что она является границей зоны Бриллюэна для одномерного кристалла, образуемого узлами дискретной сетки. Дисперсионная кривая вблизи этой точки имеет вид

$$E \approx E_0 - \frac{\hbar^2 \Delta k_z^2}{2m_0}, \quad (2.35)$$

где $E_0 = \frac{2\hbar^2}{m_0 a_z^2}$, а $\Delta k_z = k_z - \frac{\pi}{a_z}$.

Таким образом, в рассматриваемом «кристалле» на узлах дискретной сетки образуется две «долины»: одна из них, находящаяся в точке $k_z = 0$ соответствует решению физической задачи, другая, «паразитная», расположена в точке $k_z = \frac{\pi}{a_z}$, существует только за счёт использования рассматриваемой модели дискретизации. Кроме того, рассматривая теорему Блоха (2.33) для решения в «паразитной» долине, можно заметить:

$$\lim_{k_z \rightarrow \frac{\pi}{a_z}} \psi(z_{i\pm 1}) = \psi(z_i) \lim_{k_z \rightarrow \frac{\pi}{a_z}} \exp(ik_z a_z) = -\psi(z_i), \quad (2.36)$$

т.е. решения для «паразитной» долины осциллируют с «постоянной решётки» a_z .

Численное решение уравнения Шрёдингера для рассматриваемых в работе структур отличается от выше рассмотренных дисперсионных зависимостей лишь наличием граничных условий Дирихле на границах дискретной сетки. На рис. 2.4 показаны результаты численного решения уравнения Шрёдингера для одномерной потенциальной ямы, а также первая и последняя волновые функции, соответствующие основным состояниям физической и «паразитной» долинам соответственно.

Для задачи, ограничивающейся приближением эффективной массы наличие в решении «паразитных» состояний однозначно связано с используемой точностью дискретной сетки: с уменьшением шага сетки a_z растёт положение «паразитной» долины и возрастает промежуток собственных значений, соответствующий решению исходного непрерывного уравнения Шрёдингера. Кроме того, (см. разд. 2.3.2) с ростом значения энергии уровня E_α понижается населённость данного уровня носителями. Зафиксировав требуемую точность решения исходного непрерывного уравнения Шрёдингера, и используя как аналитическое решение (2.34), в работе был получен оценочный критерий для установления факта влияния «паразитных» состояний на численное решение. В работе была установлена относительная погрешность для соответствия (2.34) непрерывному параболическому решению в $\approx 10^{-3}$, что соответствует 25% от всех собственных значений гамильтониана дискретного уравнения Шрёдингера (2.18). В работе установлено значение для предела по энергии при нахождении концентрации в $15 k_B T$. Таким образом, при работе численной процедуры для исключения влияния «паразитных» состояний на решение задачи с уравнениями Шрёдингера и Пуассона должно выполняться неравенство:

$$|E_{\alpha=0,25 \times N} - \min(\min(\Delta E_C(z) - e\varphi(z)), E_{\alpha=1})| < 15 k_B T, \quad (2.37)$$

где N — полное количество узлов на дискретной сетке, равное порядку матрицы гамильтониана дискретного уравнения Шрёдингера.

2.3.5 Методика численного расчёта вольт-фарадной характеристики и профиля наблюдаемой концентрации

Для извлечения вольт-фарадной характеристики из результатов численного моделирования на основе самосогласованного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона процедура решения последних производится для дискретного ряда напряжений смещения V_i . Напряжение

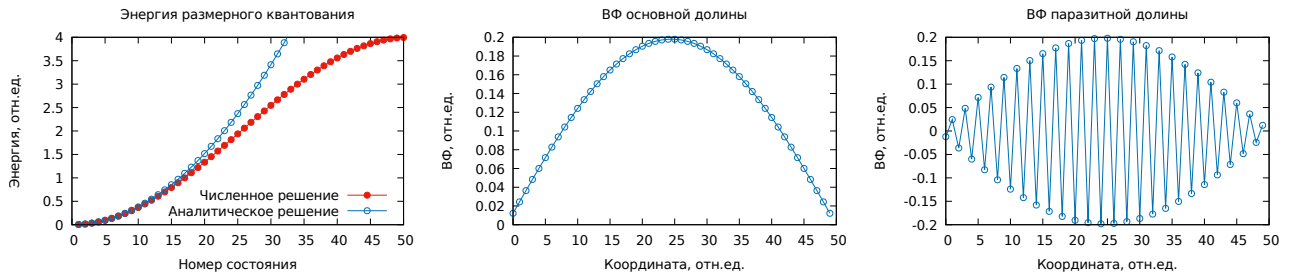


Рис. 2.4. Результат численного решения уравнения Шрёдингера для бесконечной квантовой ямы, иллюстрирующий ограничения дискретной схемы.

смещения выражается как граничное условие Дирихле для уравнения Пуассона (2.8). Из полученного профиля электростатического потенциала $\varphi(z)$ по теореме Гаусса извлекается значение удельного заряда на контактах структуры с координатами z_1 и z_2 :

$$\varepsilon_0 \left(\varepsilon \frac{\partial \varphi}{\partial z} \Big|_{z=z_2} - \varepsilon \frac{\partial \varphi}{\partial z} \Big|_{z=z_1} \right) = \frac{Q}{S}, \quad (2.38)$$

где S — площадь поперечного сечения структуры.

Значение производной потенциала $\frac{\partial \varphi}{\partial z}$ вычисляется при помощи конечно-разностной оценки:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} \approx \frac{\varphi(z_{i+1}) - \varphi(z_i)}{z_{i+1} - z_i}. \quad (2.39)$$

Для каждого из напряжений смещения V_i заряд на контактах определяется для трёх точек напряжения: собственно V_i , а также на двух точках на небольшом расстоянии ΔV : $V_i \pm \Delta V$. Из полученных таким образом данных по конечно-разностным оценкам [79] аппроксимируются значения ёмкости и её первой производной для каждого из напряжений смещения V_i :

$$\begin{aligned} C(V_i) &\approx \frac{Q(V_i + \Delta V) - Q(V_i - \Delta V)}{2 \Delta V}, \\ \frac{\partial C}{\partial V} \Big|_{V=V_i} &\approx \frac{Q(V_i + \Delta V) - 2Q(V_i) + Q(V_i - \Delta V)}{(\Delta V)^2}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Таким образом, из полученных зависимостей электрической ёмкости и её производным выражается [7] зависимость наблюдаемой (apparent) концентрации:

$$\begin{aligned} n_{\text{app}}(z_{\text{app}}) &= \frac{C^3}{e \varepsilon \varepsilon_0 S^2} \left(\frac{\partial C}{\partial V} \right)^{-1}, \\ z_{\text{app}} &= \frac{\varepsilon \varepsilon_0 S}{C}. \end{aligned} \quad (2.41)$$

2.4 Оптимизация оптических и энергетических характеристик двойной туннельно-связанной квантовой ямы

2.4.1 Расчёт энергетического спектра в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs туннельно-связанных квантовых ям

Одной из структур, рассматривавшихся в работе, стала двойная туннельно-связанная квантовая яма (ТСКЯ), представляющая собой две взаимодействующие $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs КЯ,

разделённые достаточно узким GaAs барьером. Известно [106], что в полупроводниковых гетероструктурах с ТСКЯ существует большое число явлений, связанных с пространственным переносом горячих электронов между ямами [107] в сильном латеральном электрическом поле. Существует ряд экспериментальных исследований отрицательная дифференциальная проводимость и колебания электрического тока в ТСКЯ [106]. Характерные геометрические параметры указаны в таблице 2.1. Параметры зонной структуры $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ были взяты из [41, 108]

Таблица 2.1. Характерные геометрические параметры для ТСКЯ на основе InGaAs/GaAs

Параметр	Обозначение	Значение
Ширина первой КЯ	W_1	8 нм
Состав $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ для первой КЯ	x_1	0,08
Ширина барьера	W_B	4 нм
Ширина второй КЯ	W_2	18 нм
Состав $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ для второй КЯ	x_2	0,10
Фоновое донорное легирование	N_d	$1 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$

На рис. 2.5 приведена зонная диаграмма двойной ТСКЯ: положения и вид энергетических уровней, квадраты модуля плавных огибающих волновых функций и профиль потенциальной энергии для системы с исходными параметрами (табл. 2.1) с учётом и без учёта сегрегации.

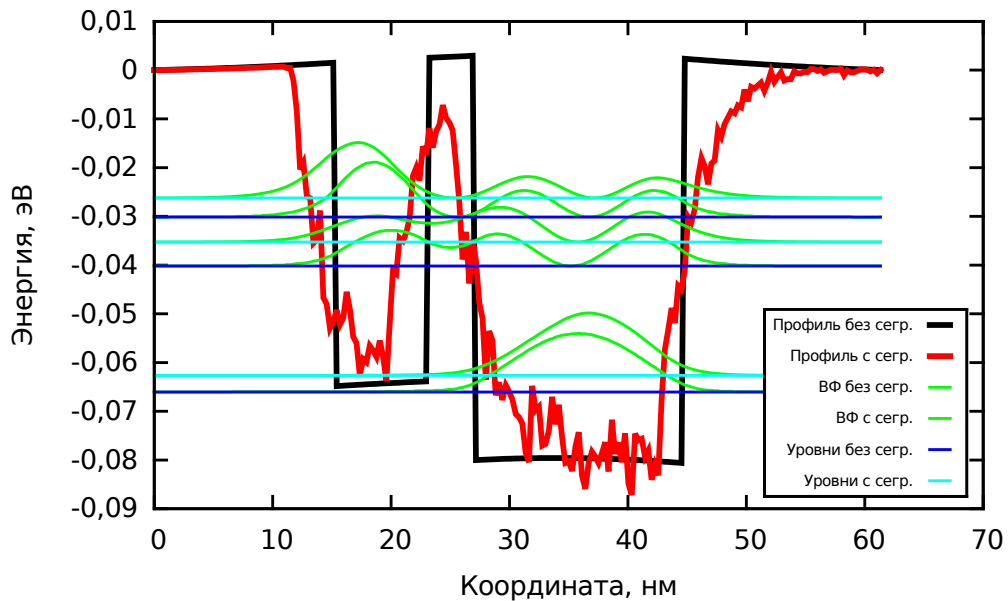


Рис. 2.5. Зонная диаграмма и волновые функции двойной туннельно-связанной квантовой ямы

Как видно, в данной системе для рассматриваемых параметров существует три энерге-

тических уровня размерного квантования. На первом уровне носители локализованы преимущественно во второй, «широкой» яме, на третьем уровне — в первой, «узкой». В этом смысле второй уровень является обобществлённым между КЯ. В данной главе исследовались зависимости вида плавных огибающих волновых функций, положения энергетических уровней, матричные элементы оператора координаты $X_{i,j} = \int \psi_i^*(z)z\psi_j(z)dz$ в зависимости от следующих геометрических и технологических параметров: ширина узкой ямы, ширина барьера между ямами, уровень легирования, присутствие эффекта сегрегации индия в твёрдом растворе InGaAs. Все зависимости исследовались для фиксированных исходных параметров (см. выше) при варьировании того параметра, зависимость от которого исследуется.

Было проведено моделирование спектра для данной структуры в зависимости от уровня легирования. С ростом концентрации легирующей примеси происходит усиление изгиба зон и меняется как энергия возможных энергетических переходов внутри системы связанных ям, так и вероятность этих переходов. Расчёты показывают, что начиная с определённого значения концентрации легирующей примеси вследствие сильного изгиба зоны в системе ям наблюдается уже не три, а только два уровня размерного квантования. На рис. 2.6 показано исчезновение двух энергетических переходов из-за выталкивания верхнего уровня из квантовой ямы при пороговом значении легирования $N_d = 7 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$.

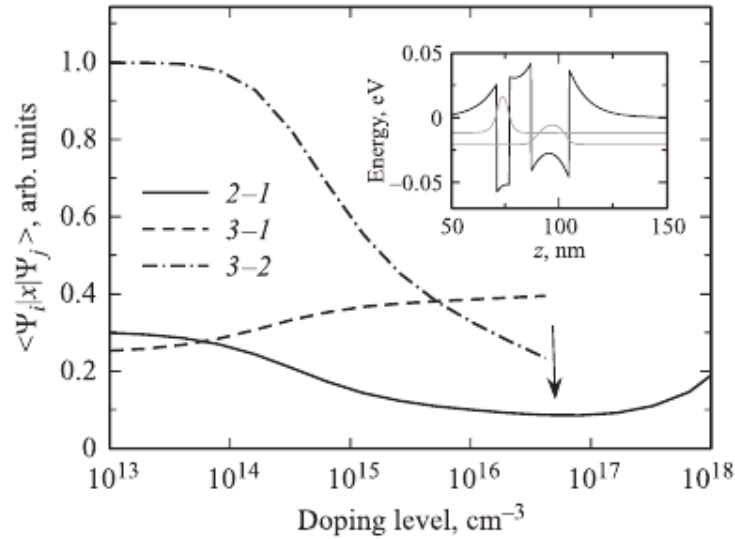


Рис. 2.6. Зависимость матричных элементов оператора координаты для межподзонных переходов в зоне проводимости от степени легирования. Стрелкой отмечен пороговый уровень легирования. На вставке — зонная диаграмма для уровня легирования $N_d = 7 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$.

2.4.2 Зависимость энергетического спектра от геометрических параметров гетероструктуры

Были произведены вычисления зависимостей энергетических характеристик исследуемой системы от ширины барьера между ямами. Полученные зависимости приведены на рис. 2.7. Легко видеть, что при увеличении ширины барьера W_B свыше 10 нм наблюдается сильное спадание матричных элементов X_{23} и X_{12} . Это обусловлено потерей взаимодействия между ямами. В самом деле, матричные элементы пропорциональны величине перекрытия волновых функций: при увеличении барьера перекрытие (произведение волновых функций) уменьшается в силу того, что волновая функция в области классически запрещённого движения быстро спадает. В пределе барьера бесконечной ширины матричные элементы, отвечающие уровням, лежащим в разных ямах, должны стремиться к нулю в силу уменьшения взаимодействия между ними, что подтверждается результатом моделирования.

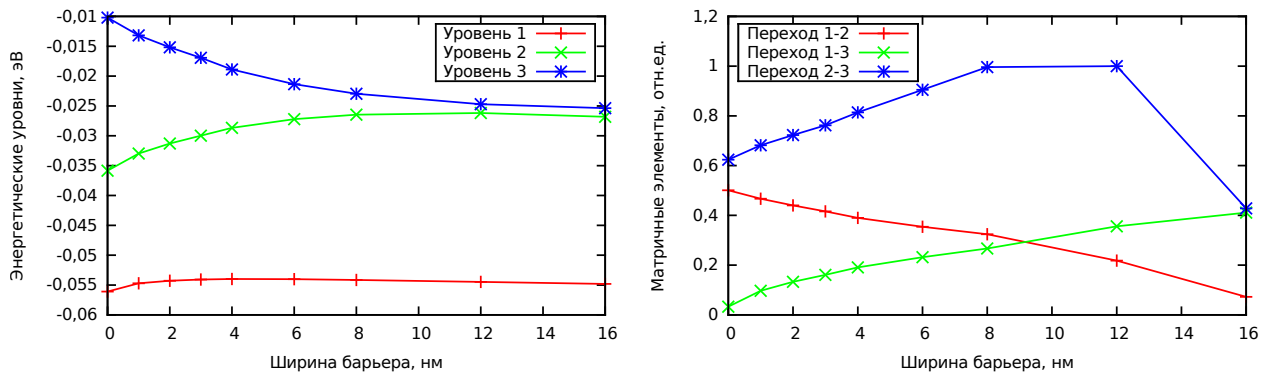


Рис. 2.7. Энергетические характеристики двойной ТСКЯ в зависимости от ширины барьера между ямами

Таким образом, очевидно, что множество уровней $\{1, 3\}$ соответствует одной из ям, в то время как уровень 2 соответствует другой яме. Как было ранее показано на зонной диаграмме, уровень 1 соответствует «широкой» яме (из-за локализации частицы). Следовательно, множество $\{1, 3\}$ соответствует «широкой» яме, уровень 2 – «узкой». Кроме того, при большой величине барьера (выше 12 нм) можно наблюдать случайное вырождение, вызванное сближением второго и третьего уровня, соответствующих разным КЯ.

В описанной выше системе также проводилось исследование энергетических характеристик от ширины узкой ямы. Полученная зависимость отображена на рис. 2.8.

Как можно видеть, существует оптимальное значение ширины узкой ямы (8 нм), при которой зависимость матричного элемента X_{23} претерпевает максимум. Также очевидно, что существует минимальное значение ширины узкой ямы (около 4 нм), поскольку при дальнейшем

уменьшении ширины ямы система становится двухуровневой. Кроме того, для матричного элемента X_{23} была проведена оптимизация в зависимости от двух рассматриваемых параметров. Полученная зависимость показана на рис. 2.9. Как можно видеть, при совместной оптимизации максимум матричного элемента X_{23} достигается при ширине узкой ямы 6 нм и ширине барьера 10 нм. Таким образом, можно сделать вывод, что данная конфигурация ТСКЯ оптимальна для наблюдения возможных эффектов пространственного переноса [107] между состояниями 2-го и 3-го уровня.

Для исследуемой системы были проведены оценки влияния на энергетические характеристики (спектр размерного квантования и матричные элементы оператора координаты) процессов сегрегации индия в составе тройного раствора $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Процессы сегрегации численно моделировались при помощи модели [109], основанной на методе Монте-Карло.

На рис. 2.10 показано влияние сегрегации на профиль состава структуры, а также отображено изменение энергетического спектра и матричных элементов под действием сегрегации (показаны результаты для нескольких значений «затравки» метода Монте-Карло).

Как можно видеть, с одной стороны, использование результатов нескольких запусков моделирования сегрегации вносит псевдослучайную «неоднозначность» в определяемые характеристики. С другой стороны, в среднем, происходит сдвиг уровней в сторону увеличения энергии, что связано с эффективным уменьшением ширины КЯ в составе структуры.

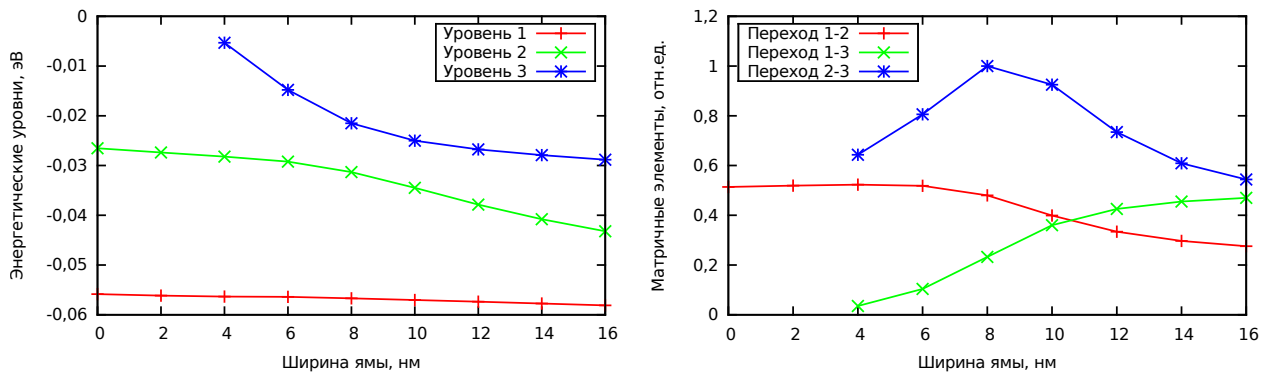


Рис. 2.8. Энергетические характеристики двойной ТСКЯ в зависимости от ширины узкой ямы

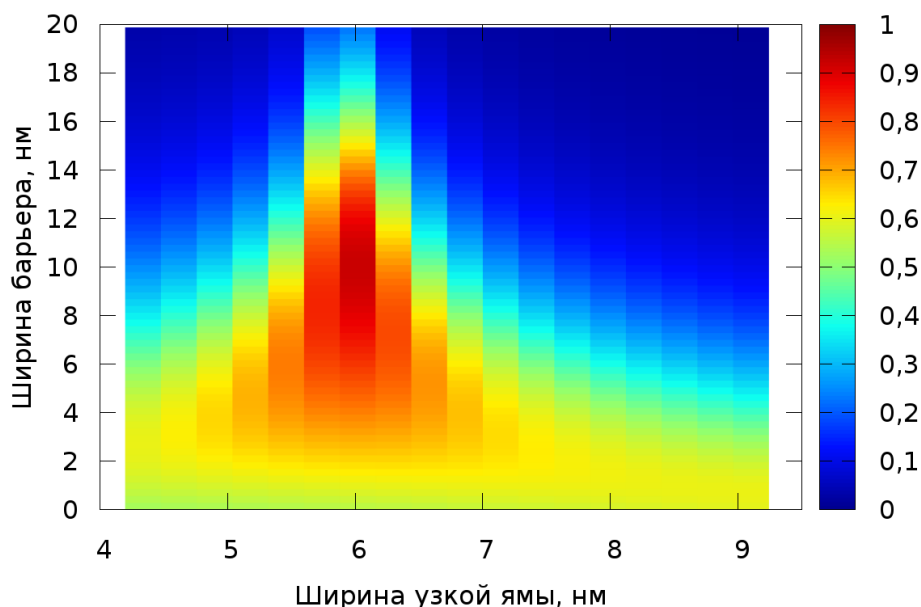


Рис. 2.9. Матричный элемент X_{23} оператора координаты в зависимости от ширины барьера и ширины узкой ямы для двойной ТСКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

2.5 Расчёт энергетического спектра и оптических характеристик структуры, состоящей из семи туннельно-связанных квантовых ям

В данной главе исследовались свойства системы, содержащей 7 туннельно-связанных КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, предназначенные для исследования эффектов пространственного переноса [107]. Гетероструктуры такого типа обычно представляют собой чередование областей с высокой и низкой подвижностью электронов, туннельно-связанных между собой. Известно, что снижение подвижности достигается за счёт большого количества гетерограниц в более узких КЯ. В исследуемой структуре областью с высокой подвижностью является широкая КЯ, а областью с низкой подвижностью — шесть узких КЯ. Структура содержит две группы из трёх $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0,3$) КЯ шириной 2 нм, разделённых 2 нм GaAs барьерами. Между группами находится широкая 15 нм $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0,15$) КЯ, отделённая от групп 4 нм GaAs барьерами (рис. 2.11, 2.12). В совместной работе [110] данные гетероструктуры были выращены методом МОС-гидридной эпитаксии при атмосферном давлении при температуре подложки 600°C

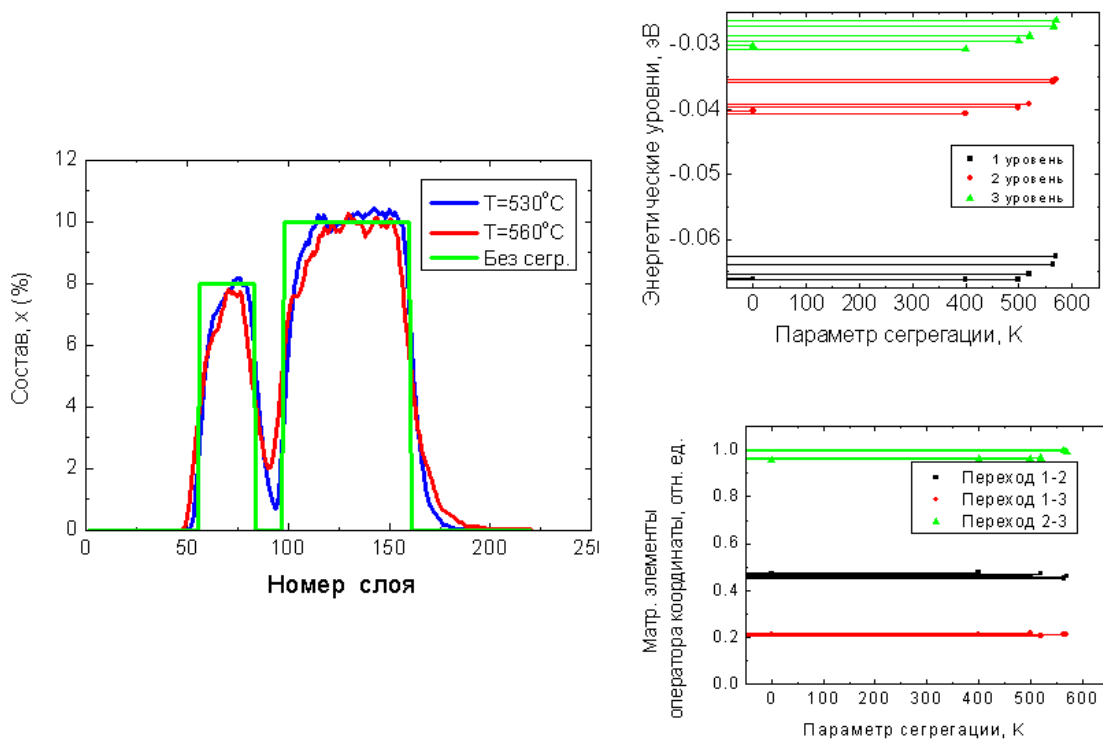
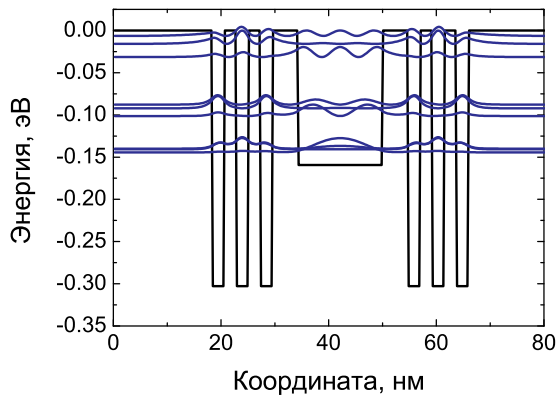


Рис. 2.10. Влияние эффекта сегрегации на спектр и матричные элементы оператора координаты для двойной ТСКЯ

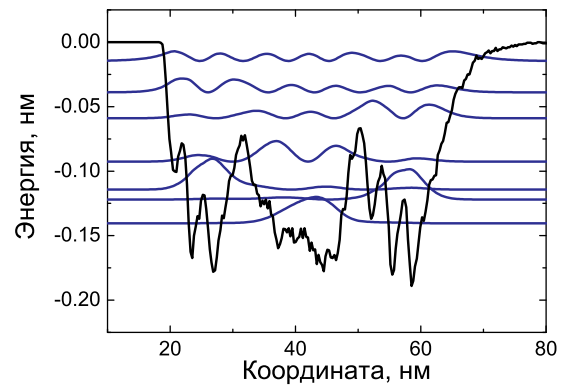
на полуизолирующих подложках [001] GaAs. Источниками элементов являлись арсин, фосфин, триметилгаллий и триметилиндий. Исследуемая гетероструктура состояла из двадцати периодов туннельно-связанных КЯ толщиной 80 нм. Для компенсации упругих напряжений сжатия, создаваемых слоями InGaAs, в середине каждого периода на равном расстоянии от КЯ выращивали слой GaAsP с содержанием фосфора 10% толщиной 10 нм.

Для данных структур был проведён расчёт спектра размерного квантования и межзонных матричных элементов $\langle \Psi_i | \Psi_j \rangle$. Показано, что в случае идеально прямоугольного исходного профиля состава уровни энергетического спектра структуры образуют минизоны, образованные обобщёнными уровнями соседних ям (рис. 2.11а.).

При этом известно, что размытие гетерограниц происходит вследствие физических процессов, происходящих в процессе роста гетероструктуры [110]. В частности, эффект сегрегации индия приводит к выталкиванию атомов In из растущего слоя и искажению профиля состава. Проводилось моделирование процесса сегрегации при помощи модели, основанной на методе Монте-Карло [109]. С её помощью был получен профиль состава, преобразованный в профиль потенциальной энергии и эффективной массы, которые использовались в качестве входных дан-

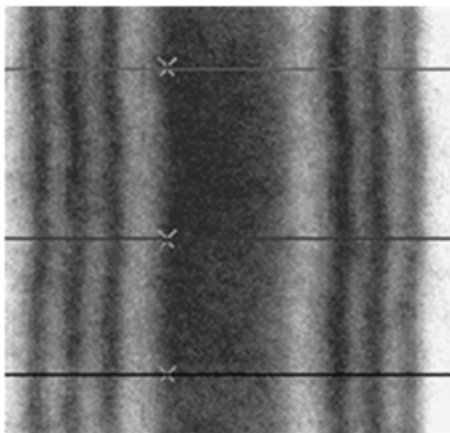


а.

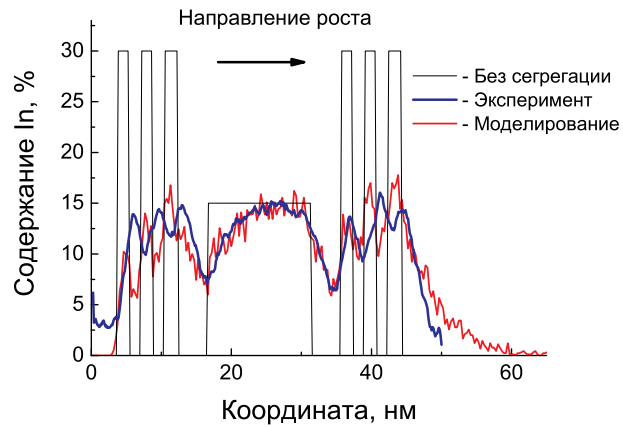


б.

Рис. 2.11. Зонная диаграмма исследуемой ТСКЯ для идеального профиля состава (а.) и для размытого в результате сегрегации (б.)



а.



б.

Рис. 2.12. СПЭМ изображение одного периода исследуемой структуры [110] (а.) и профили состава: исходный, полученный с помощью Z-контраста, полученный моделированием (б.)

ных для уравнения Шрёдингера. Результаты Монте-Карло-моделирования в сравнении с «идеальным» прямоугольным профилем приведено на рис. 2.11. Сопоставление результатов численного моделирования роста с результатами эксперимента приведено на рис. 2.12. Можно заметить хорошее согласие экспериментально полученных профилей состава с результатами моделирования, что позволяет сделать вывод о том, основным фактором, влияющим на размытие гетеро-

границ, является сегрегация индия. Для реального профиля состава характерно эффективное снижение барьеров между потенциальными ямами в составе структуры, что, в свою очередь, приводит к потере структуры взаимодействующих уровней (см. рис. 2.11). В результате, спектр и распределение межзонных матричных элементов приобретают вид, характерный для одиночной КЯ.

Полученные энергии уровней размерного квантования сопоставлялись с результатами измерений спектров фотолюминесценции и фотопроводимости (ФЛ и ФП) в исследуемых структурах (рис. 2.13). Дифференцируя спектр фотопроводимости, можно извлечь значения энергий трёх оптических переходов $\hbar\omega = 1,37; 1,40; 1,43$ эВ. Стрелками показаны участки с максимальной производной в спектре ФП, соответствующие этим значениям. Предполагается, что первое значение энергии соответствует оптическому переходу с участием ВФ электронов и дырок, локализованных преимущественно в широкой КЯ. Вероятнее всего, переходы с более высокими энергиями получаются наложением пиков с близкими по значению энергиями. Из сравнения рис. 2.13 а. и б. видно, что экспериментальные энергии оптических переходов хорошо согласуются с расчётами для реального профиля. Вклад в спектры ФП дают все оптические переходы, в ФЛ — только от перехода с минимальной энергией.

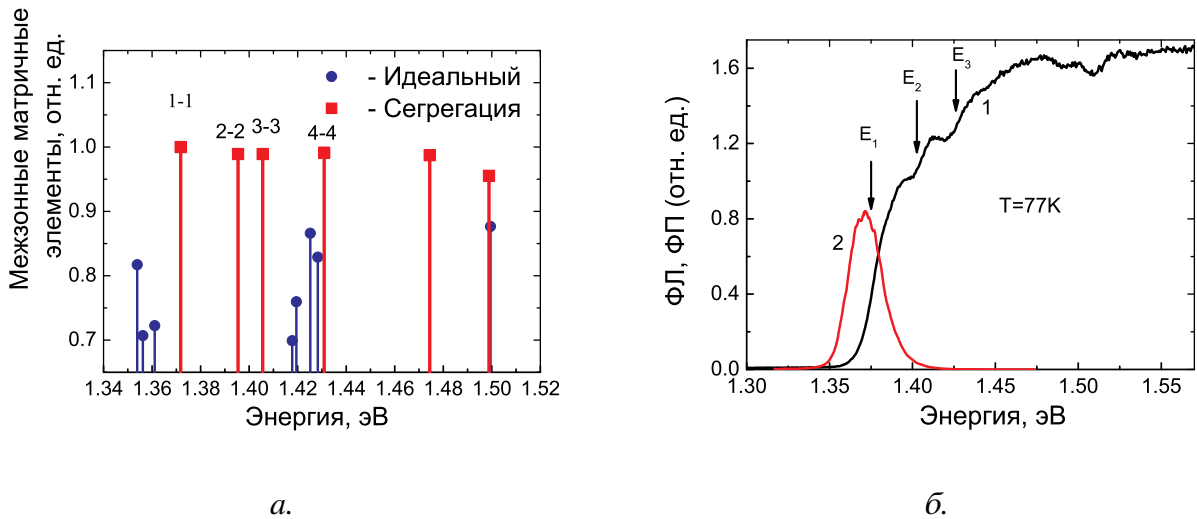


Рис. 2.13. Матричные элементы межзонных переходов для идеального прямоугольного прямоугольного профиля и профиля с учётом сегрегации индия (а), спектры фотопроводимости (ФП) и фотолюминесценции (ФЛ) в сравнении с результатами расчёта энергии межзонных переходов

Сравнения с расчётами матричных элементов $\langle \psi_i | \psi_j \rangle$ для межзонных переходов показывают, что наиболее вероятным в спектре ФЛ можно считать основной оптический переход

$E_{e1} - E_{HH1}$, ВФ которого локализованы в широкой яме. Из сопоставления спектров ФП и ФЛ видно, что пик ФЛ расположен ниже по энергии в сравнении с энергией перехода, полученной из ФП. Данный факт можно объяснить влиянием неоднородности состава и толщины КЯ в плоскости роста, другими словами, наличием шероховатостей гетерограниц, которые наблюдаются на снимках, полученных методами сканирующей просвечивающей электронной микроскопии (СПЭМ). Сдвиг пика ФЛ на 7–10 мэВ в сторону более низких энергий соответствует значению неоднородности по толщине порядка 1 нм, наблюдаемой на СПЭМ изображении (рис. 2.12), и подтверждается расчётными оценками.

2.6 Анализ структур с одиночными квантовыми ямами и δ -легированными слоями

2.6.1 Вольт-фарадные характеристики и профили наблюдаемой концентрации одиночных $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs квантовых ям

Одним из объектов исследования в настоящей работе послужило множество структур на основе твёрдого раствора $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, содержащие одиночную квантовую яму и/или δ -легированный слой. Для данных структур производилось моделирование энергетического спектра уровней размерного квантования, распределения потенциала и концентрации носителей на основе рассмотренной выше схемы решения уравнений Шрёдингера и Пуассона. Моделировалось приложение различного напряжения смещения на один из концов структуры, что позволило получить зависимость заряда и ёмкости, т.е. вольт-фарадные характеристики (ВФХ). Рассматривались следующие разновидности структур:

- Одиночная КЯ
- Одиночный δ -слой
- КЯ и δ -слой (КЯ ближе к затворному контакту, чем δ -слой)
- δ -слой и КЯ (δ -слой ближе к затворному контакту, чем КЯ)

В работе рассматривается структура, содержащая одиночную КЯ, образованную слоем твёрдого раствора $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0,4$), находящимися между слоями GaAs. Схема расположения слоёв структуры показана на рис. 2.14а. Пример зонной диаграммы структуры для одного из рассматриваемых напряжений смещения показан на рис. 2.14б.

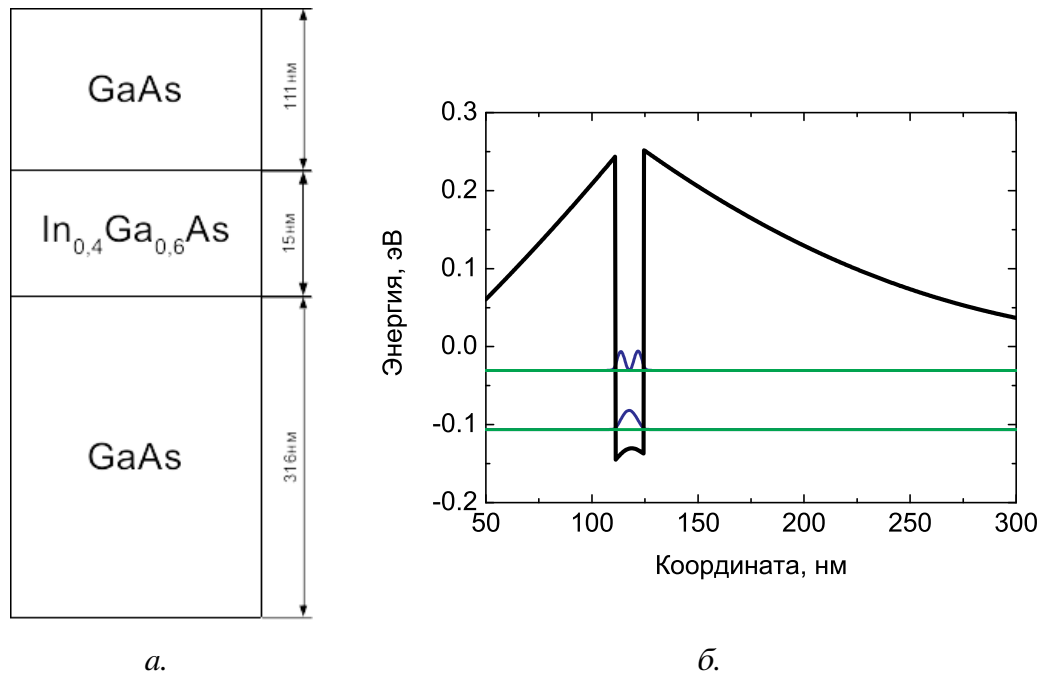


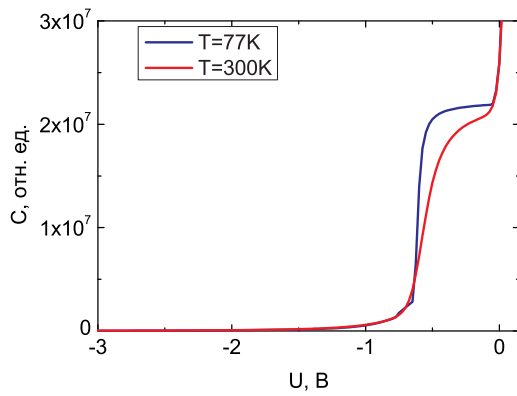
Рис. 2.14. Структура с одиночной квантовой ямой: схема расположения слоёв (а.) и зонная диаграмма (б.)

При помощи описанного выше численного метода было проведено моделирование энергетического спектра данной структуры при различных напряжениях смещения, после чего получены ВФХ и профили наблюдаемой концентрации. На рис. 2.15 приведены полученные результаты. Как можно видеть, полученные результаты согласуются с предыдущими работами по данной теме (в частности, [4–7]). Именно, наличие КЯ в структуре является причиной появления участков «ступеньки» и «плато» на ВФХ, а также пика на профиле наблюдаемой концентрации. Также обнаружено смещение положения пика наблюдаемой концентрации при изменении температуры, объяснимого наличием температурного смещения энергии дна КЯ. Кроме того, с ростом температуры происходит увеличение ширины пика наблюдаемой концентрации за счёт уширения переходного участка функции распределения Ферми-Дирака.

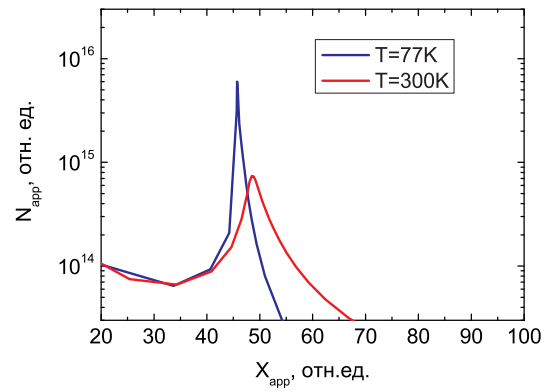
2.6.2 Вольт-фарадные характеристики и профили наблюдаемой концентрации одиночных δ -легированных слоёв

Далее в работе исследовались структуры, состоящие из барьерных слоёв GaAs, разделённых δ -легированным слоем. Схема слоёв и зонная диаграмма структуры показаны на рис. 2.16.

Для данной структуры производилось исследование влияния на ВФХ различных параметров, в частности, степени легирования δ -слоя при зафиксированных прочих параметрах (гео-

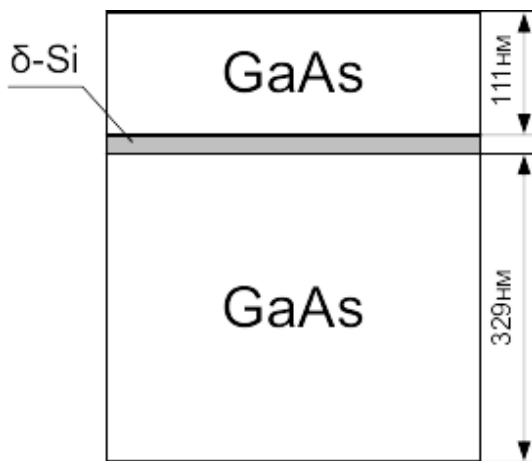


а.

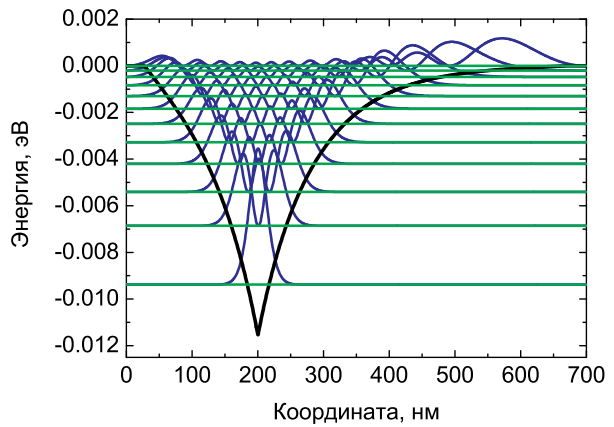


б.

Рис. 2.15. Вольт-фарадные характеристики (а.) и профили наблюдаемой концентрации (б.) для одиночной $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ КЯ



а.



б.

Рис. 2.16. Структура с одиночным δ -слоем: схема расположения слоёв (а.) и зонная диаграмма (б.)

метрическое расположение и форма слоя, температура). Для оценки влияния легирования использовалось значение температуры $T = 300$ К, а также δ -образная форма легированного слоя. Полученные в результате ВФХ и профили наблюдаемой концентрации приведены на рис. 2.17.

Как можно видеть, с ростом легирования увеличивается глубина квантовой ямы δ -слоя, обусловленной положительным зарядом сосредоточенной в нем примеси. Одновременно с этим

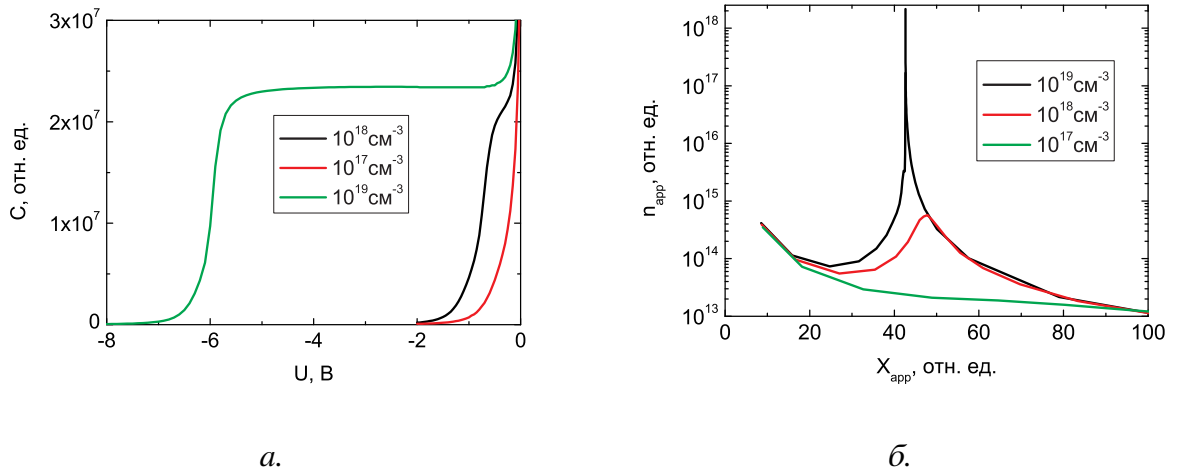


Рис. 2.17. Вольт-фарадные характеристики (а.) и профили наблюдаемой концентрации (б.) для структуры с одиночным δ -слоем в GaAs

возрастает её влияние на ВФХ, что выражается в появлении и росте ступенчатого участка на зависимости, что, в свою очередь, выражается в виде роста значения пика на профиле наблюдаемой концентрации.

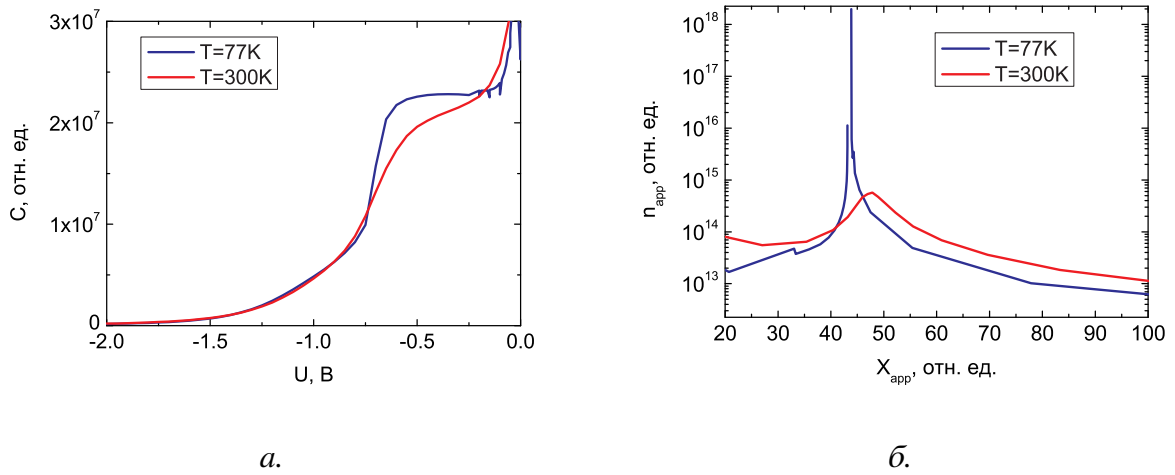


Рис. 2.18. Вольт-фарадные характеристики (а.) и профили наблюдаемой концентрации (б.) для структуры с одиночным δ -слоем в GaAs для различных температур

Также производилось исследование характеристик рассматриваемой структуры от температуры. При этом значение уровня объёмного легирования фиксировалось равным $N_d =$

10^{18} см^{-3} . На рис. 2.18 приведены результаты моделирования для рассматривавшихся значений температуры ($T = 77 \text{ К}$; 300 К).

Как можно видеть, характер изменения ВФХ в зависимости от температуры для структуры с δ -слоем повторяет соответствующий для одиночной КЯ: происходит аналогичное «размытие» ступенчатого участка ВФХ, сопровождаемого уширением, усилением и смещением пика профиля наблюдаемой концентрации с температурой.

Приведённые выше результаты соответствуют «идеальному» случаю распределения примеси в δ -слое: δ -образному. Однако получаемые в эксперименте δ -легированные слои имеют конечную толщину и пространственное распределение примеси, близкое к гауссову.

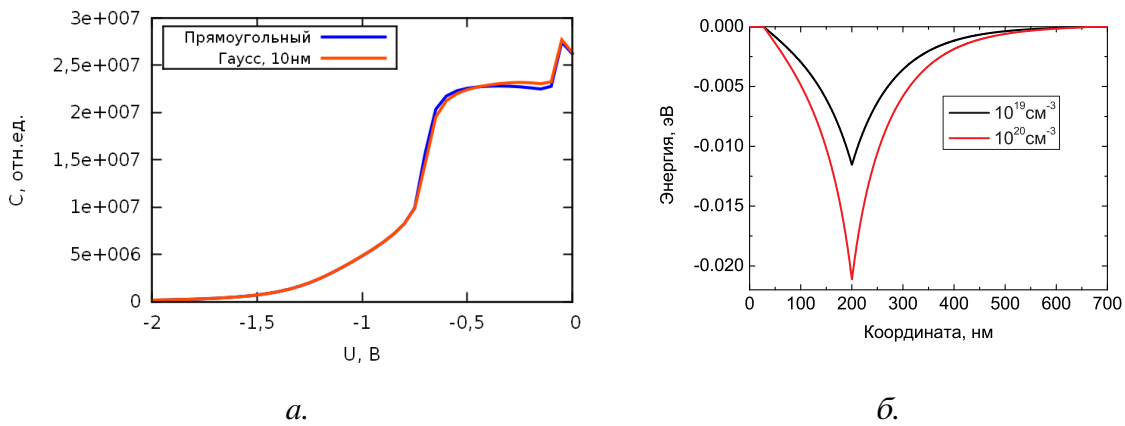


Рис. 2.19. Вольт-фарадные характеристики структур с δ -слоями прямоугольной формы и соответствующей распределению Гаусса при $T=77 \text{ К}$ (а.) и профиль потенциальной энергии в зависимости от степени легирования (б.)

Была проведена оценка влияния формы пространственного распределения примеси в δ -слое на его характеристики. Для этого проводилось моделирование структуры, содержащей δ -слой с гауссовым распределением примеси со значением полуширины на полувысоте 10 нм по сравнению с «идеальным» для степени легирования $2,7 \times 10^{10} \text{ см}^{-3}$. Результаты сравнения приведены на рис. 2.19.

2.6.3 Вольт-фарадные характеристики структур, содержащих InGaAs/GaAs квантовую яму и δ -слой

Влияние параметров геометрии и роста

После исследования отдельных компонент системы (одиночная КЯ и δ -легированный слой) в данной главе исследовались свойства системы, содержащей взаимодействующие между собой In_xGa_{1-x}As -КЯ и δ -легированный слой. Схема расположения слоёв и зонная диаграмма структуры приведена на рис. 2.20. Для данных структур исследовалось влияние геометрических факторов и параметров роста (геометрии расположения и формы слоёв, степени легирования), температуры на их энергетический спектр, ВФХ и профили наблюдаемой концентрации носителей.

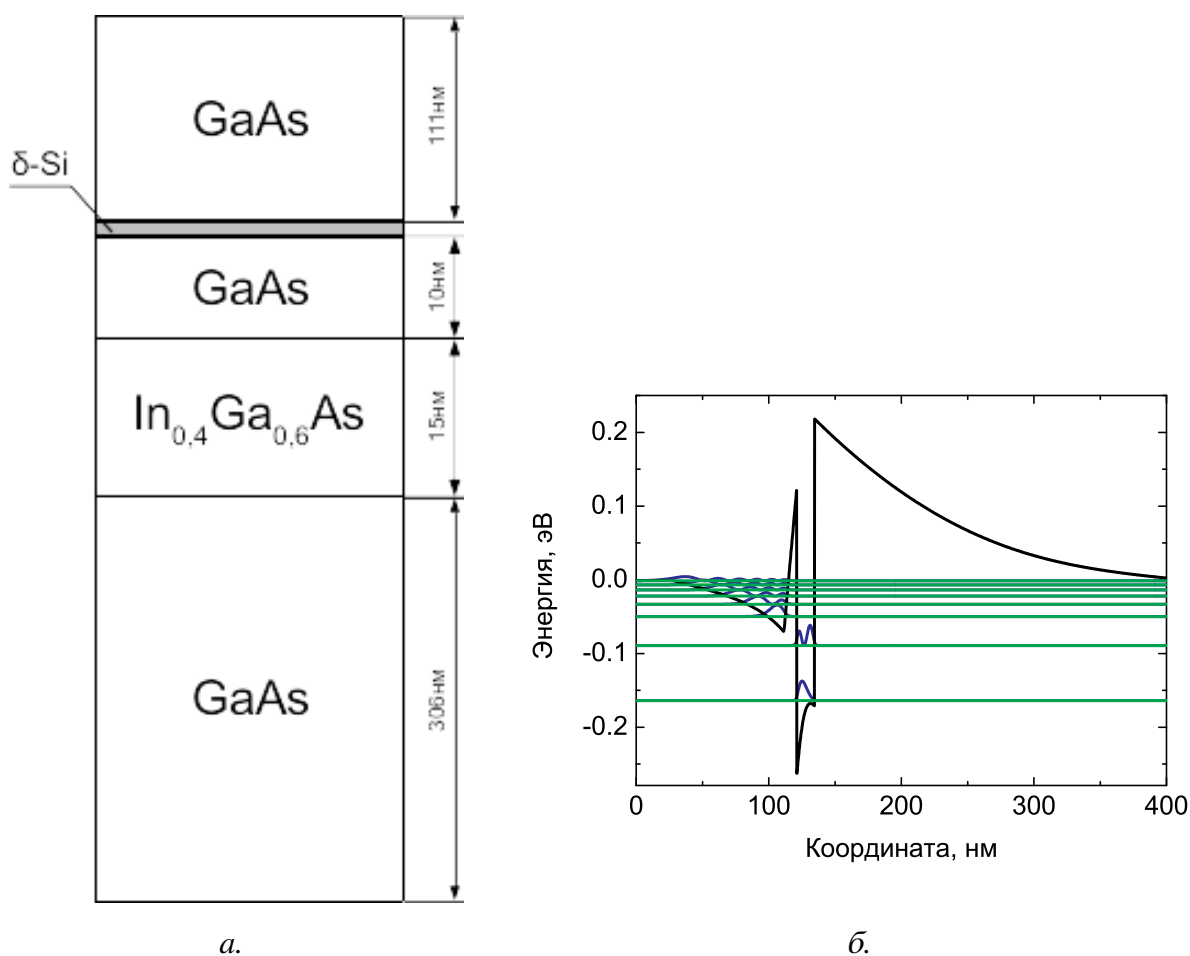


Рис. 2.20. Схема расположения слоёв (а.) и зонная диаграмма для структуры (б.), содержащей In_xGa_{1-x}As /GaAs КЯ и Si δ -легированный слой

При зафиксированном значении легирования δ -слоя, равном $2,7 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, исследовалось

влияние температуры на ВФХ рассматриваемой структуры. Полученные результаты приведены на рис. 2.21.

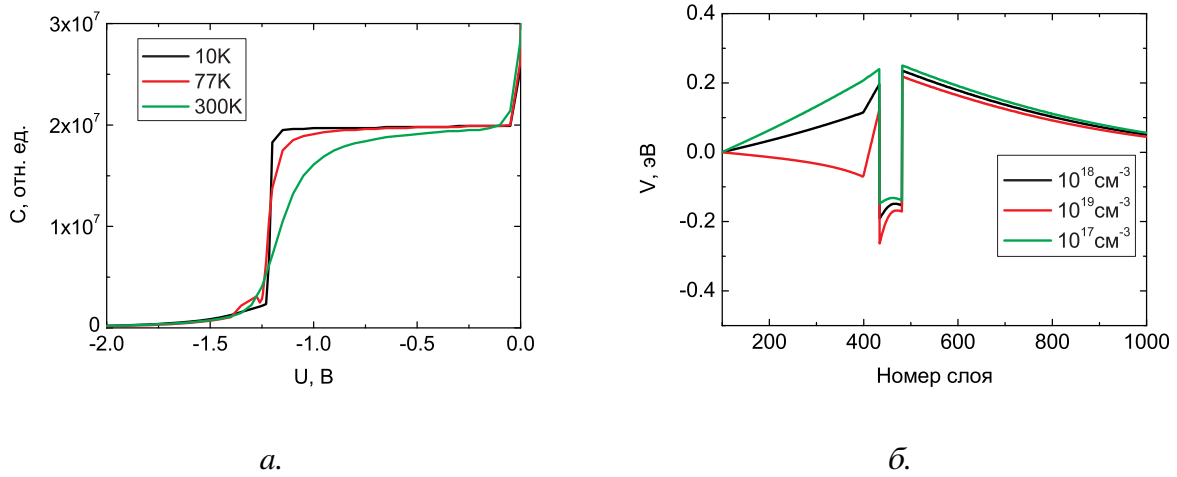


Рис. 2.21. Зависимость ВФХ системы из $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs КЯ и Si δ -слоя от температуры (а.) и зависимость профиля потенциальной энергии данной системы от степени легирования δ -слоя (б.)

Как можно видеть, в целом, изменение зависимости ВФХ от температуры совпадает с соответствующим для одиночной КЯ и одиночного δ -слоя.

Для данной структуры, содержащей КЯ и δ -легированный слой, производилось исследование её ВФХ и профилей наблюдаемой концентрации носителей в зависимости от величины легирования δ -слоя. Значения остальных параметров структуры были зафиксированы на значениях рис. 2.16, используя температуру $T = 300$ К. Полученные в результате моделирования профили распределения потенциала, ВФХ и наблюдаемой концентрации показаны на рис. 2.22

Как видно из результатов моделирования, влияние δ -слоя может быть выявлено лишь с определённого порогового значения легирования. Наличие δ -слоя в структуре проявляется, как появление дополнительного максимума на профиле наблюдаемой концентрации; на профиле потенциальной энергии одиночная $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ КЯ преобразуется к двойной, второй минимум потенциальной энергии имеет характерный для δ -слоя треугольный вид. ВФХ структуры приобретает более сложный качественный вид, имеющий два ступенчатых участка.

Вид полученной ВФХ объясним следующим образом: при повышении обратного смещения в первую очередь происходит обеднение заряда $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ КЯ, поскольку она находится ближе к затворному контакту (см. рис. 2.20). В результате этого на ВФХ возникает первое «плато» и ступенчатый участок, что проявляется на профиле наблюдаемой концентрации как пик

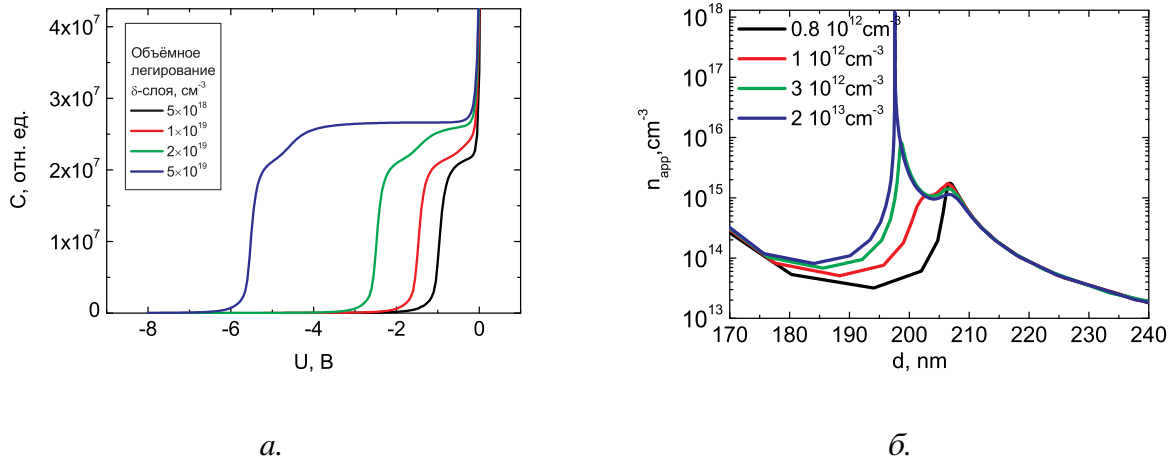


Рис. 2.22. Вольт-фарадные характеристики (а.) и профили видимой концентрации (б.) структуры в зависимости от уровня легирования δ -слоя

концентрации. При дальнейшем повышении обратного напряжения подобный процесс повторяется для второй потенциальной ямы, образованной δ -слоем. Результатом этого является появление второго ступенчатого участка и участка «плато», а также второго пика на профиле наблюдаемой концентрации. Аналогичный ряд зависимостей был получен при вариации состава КЯ (рис. 2.23)

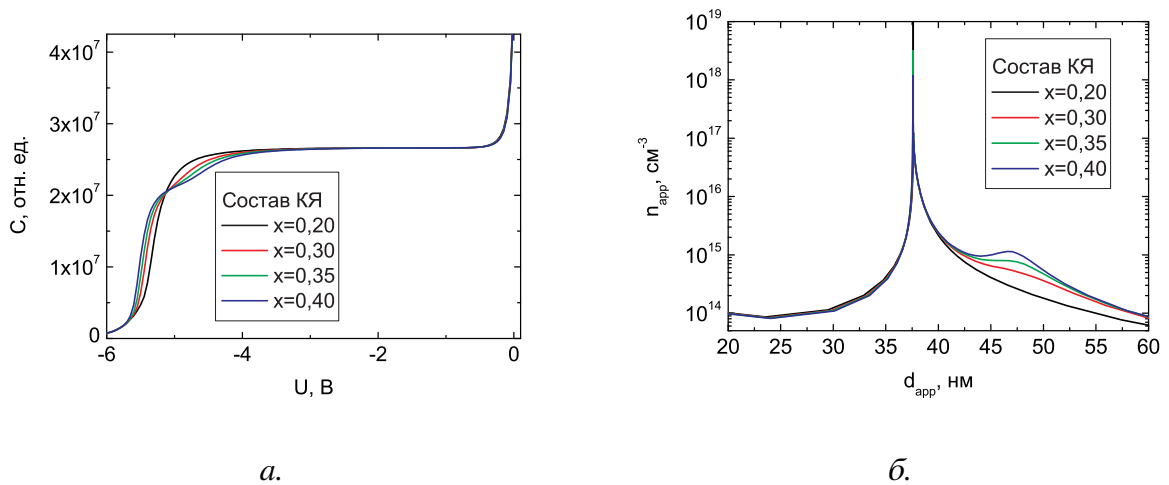


Рис. 2.23. Вольт-фарадные характеристики (а.) и профили видимой концентрации (б.) структуры в зависимости от состава КЯ

При этом можно заметить качественную разницу в форме максимумов компонентов

структуры на профиле видимой концентрации: максимум, соответствующий КЯ имеет более «острый» вид и треугольную форму, в то время как максимум δ -слоя имеет плавную форму, сравнимую с гауссовой.

2.6.4 Влияние взаимного расположения δ -слоя и квантовой ямы на вольт-фарадные характеристики и профили наблюдаемой концентрации

Зафиксировав ряд параметров структуры, в частности, для значения легирования δ -слоя, равного $2,7 \times 10^{10} \text{ см}^{-2}$, проводились исследования для различных вариантов геометрического расположения КЯ и δ -слоя друг относительно друга. Результаты моделирования ВФХ и профилей наблюдаемой концентрации показаны на рис. 2.24 вместе с зонными диаграммами для данных структур.

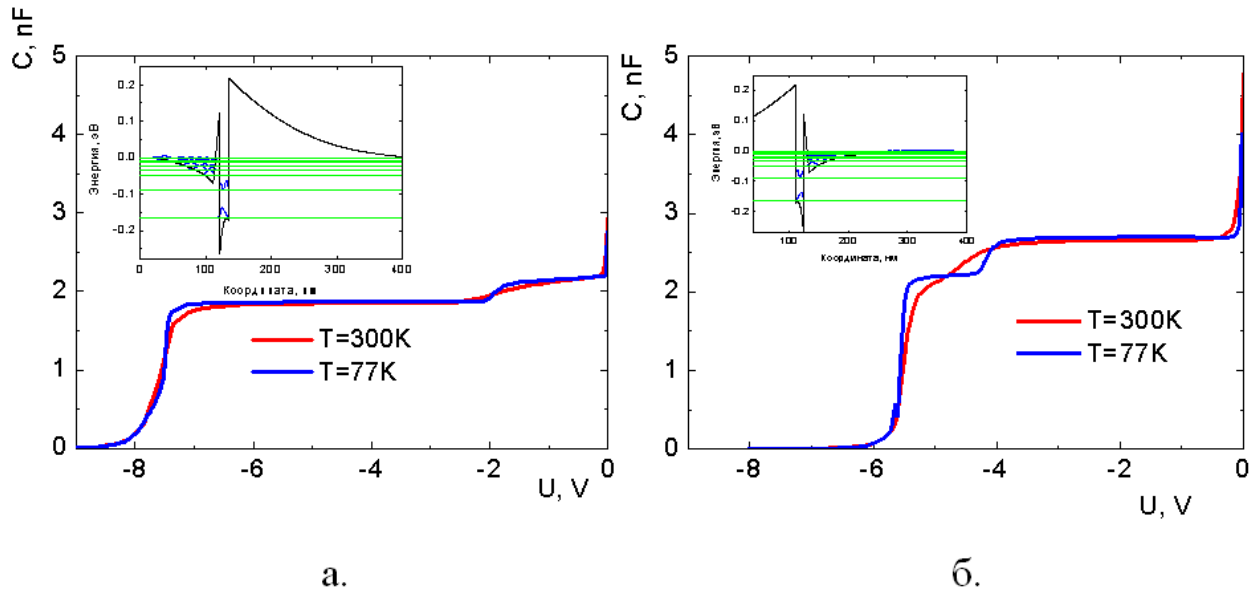


Рис. 2.24. ВФХ и зонные диаграммы в зависимости от порядка следования КЯ и δ -слоя: δ -слой-КЯ (а.) и КЯ- δ -слой (б.)

Как можно видеть, в общем случае, влияние температуры на ВФХ структур аналогично рассмотренному ранее для отдельных компонентов, т.е. резкость ступенек повышается с уменьшением температуры. Анализируя представленные на рис. 2.24 профили концентрации электронов, можно сделать вывод, что при низком уровне легирования максимум концентрации носителей соответствует положению КЯ. При плавном увеличении уровня легирования δ -слоя проис-

ходит раздвоение пика, что также наблюдается на экспериментальных зависимостях (рис. 2.25). Легко видеть, что более высокий и узкий пик соответствует положению δ -слоя, при этом положения пиков от ямы и слоя соответствуют реальным расстояниям в структуре. При обратном расположении δ -слоя относительно КЯ соответствующий более узкий пик наблюдается с другой стороны от пика КЯ.

Кроме того, в совместной работе [83] проводилось экспериментальное исследование подобных структур, содержащих КЯ и дельта-слой. Исследуемые структуры были выращены методом МОС-гидридной эпитаксии при пониженном давлении на установке AIX 200RF на подложках полуизолирующего GaAs [100]. Были изучены гетероструктуры с различным взаимным расположением КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0,17$; ширина 10 нм) и встроенного δ -слоя кремния. В одном случае δ -слой встраивался выше квантовой ямы на расстоянии 10 нм (δ -слой/КЯ), в другом — ниже, т.е. ближе к подложке, на том же расстоянии 10 нм (КЯ/ δ -слой). В обоих случаях КЯ и δ -слой были зарощены покровным слоем (ПС) GaAs толщиной $d_0 = 200\text{ нм}$. Слойевые значения концентрации δ -слоёв соответствуют значениям $N_s = 1 \times 10^{12}\text{ см}^{-2} - 1.9 \times 10^{13}\text{ см}^{-2}$. Концентрация фонового легирования порядка 10^{15-3} . На основе данных гетероструктур были изготовлены кольцевые диодные структуры Au/GaAs, которые могут быть использованы как тестовые структуры при производстве НЕМТ-транзисторов. Кольцевые диодные структуры (КДС) создавались с помощью фотолитографии по слою Au на поверхности GaAs.

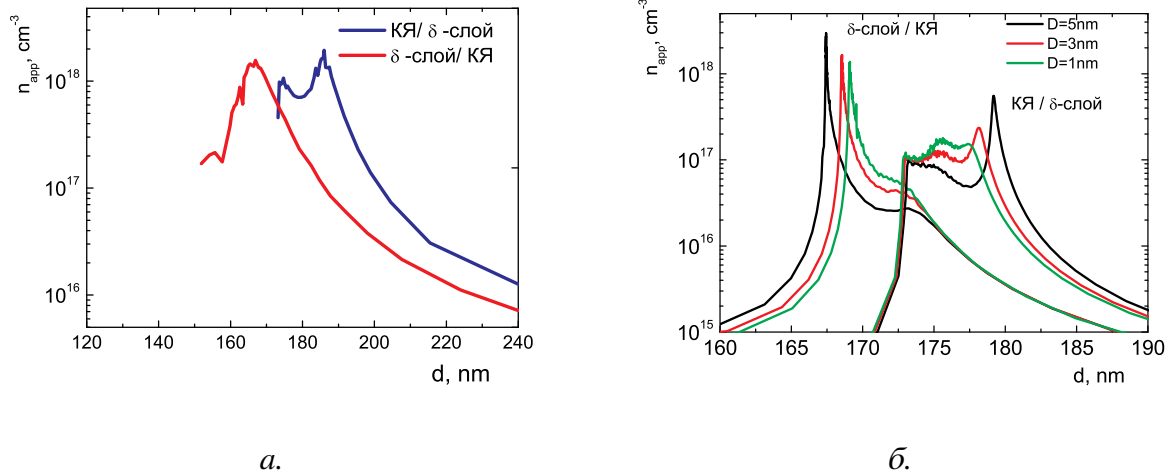


Рис. 2.25. ВФХ и зонные диаграммы в зависимости от порядка следования КЯ и δ -слоя и расстояния между ними (а.), полученные для структур с КЯ и δ -слоями экспериментальные данные (б.)

На рис. 2.25 показаны профили распределения концентрации $n_{\text{app}}(d)$ в различных структурах с δ -слоем, полученные из вольт-фарадных характеристик, измеренных эксперименталь-

но [83]. В структуре, где δ -слой располагался под КЯ, наблюдалось раздвоение пика (кривая 1), обусловленное перераспределением электронов между КЯ и δ -слоем. Для образца с обратным расположением слоя наблюдается лишь один пик, который при этом смещается в противоположную сторону от положения КЯ, что подтверждается и модельными расчётами. Значения слоевой концентрации носителей в области δ -слоя хорошо согласуются с результатами измерений эффекта Холла [83], а также с соответствующими результатами численного моделирования.

В совместной работе [83] проводилось экспериментальное исследование подвижности для данных структур. Результаты измерения подвижности носителей в эффекте поля приведены на рис. 2.26. Очевидно, что значения подвижности значительно выше для структур, содержащих сочетания КЯ и δ -слоя, причём наибольшее значение достигается при конфигурации «КЯ- δ -слой». По характеру температурной зависимости можно сказать, что в образцах с КЯ подвижность растёт с понижением температуры $\mu_F \sim T^{-1}$ (рис. 2.26). Данное поведение характерно для температурной зависимости подвижности в КЯ [111], что позволяет говорить о том, что транспорт носителей в этих структурах происходит преимущественно по подзонам размерного квантования электронов в КЯ.

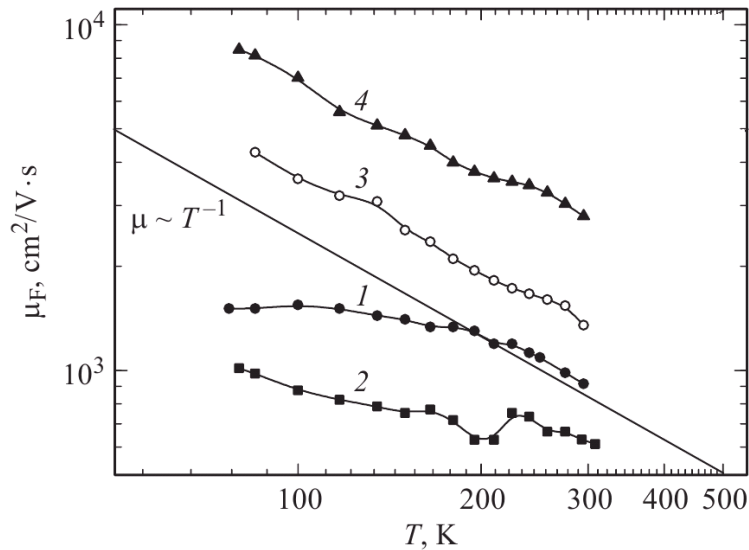


Рис. 2.26. Зависимости подвижности от температуры для структур с одиночным δ -Si с разной концентрацией (8×10^{12} (1), $1,9 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$ (2)), структуры δ -слой/КЯ (3) и структуры КЯ/ δ -слой (4)

Основываясь на полученных результатах, можно сделать вывод, что различие в расположении δ -слоя относительно КЯ влияет на распределение заряда в данной окрестности и может привести к различию в рабочих характеристиках готовых приборов, таких, например, как подвижность. В частности, наличие встроенного δ -слоя между поверхностью и КЯ может ухуд-

шать возможность управления двумерным каналом при использовании рассматриваемых структур в качестве транзисторных. Необходимо отметить, что поведение наблюдаемой концентрации в значительной степени зависит от уровня легирования δ -слоя. Всё вышеизложенное позволяет сделать предположение, что для управления зарядом в двумерном канале более выгодной является конфигурация КЯ– δ -слой.

2.7 Результаты и выводы по главе 2

1. С помощью численного моделирования на основе согласованного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона проведён расчёт энергетического спектра, профиля потенциала, ВФХ и профилей наблюдаемой концентрации для гетероструктур на основе $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs, содержащих КЯ и δ -легированные слои.
2. Наличие в гетероструктуре квантово-размерного слоя приводит к формированию ступеньки на ВФХ; положение ступеньки зависит от таких параметров как ширина КЯ и степень фонового легирования. Наличие δ -слоя в гетероструктуре приводит к появлению на ВФХ-характеристике дополнительной ступеньки, величина которой зависит от степени легирования δ -слоя. На профиле наблюдаемой концентрации носителей это сопровождается возникновением дополнительного пика.
3. Качественный вид ВФХ определяется взаимным расположением и расстоянием между КЯ и δ -слоем. Анализ результатов расчёта и данных электрофизических измерений позволяет сделать предположение, что для управления зарядом в двумерном канале КЯ более выгодной является конфигурация «КЯ перед δ -слоем».
4. Выявлены характерные особенности профилей наблюдаемой концентрации, вызванные взаимодействием потенциалов КЯ и δ -слоя. Показано, что присутствующая в пике наблюдаемой концентрации особенность обусловлена взаимодействием КЯ и δ -слоя и хорошо согласуется с данными эксперимента.

Глава 3

Особенности образования электронного газа в полупроводниковых нанопроволоках и нанотрубках

3.1 Введение

Нанопроволоки являются ярким представителем низкоразмерных структур благодаря особенностям электронного и дырочного газа, образующегося в них. Движение носителей в них ограничено теперь уже в двух направлениях, при этом их свойства определяются многочисленными квантово-механическими явлениями, а также характеристиками материалов. Благодаря тому, что нанопроволоки характеризуются высоким отношением площади поверхности к объёму, они обладают повышенной чувствительностью к внешним воздействиям. Таким образом, возникает возможность управления транспортом носителей заряда и использования их в качестве рабочего элемента полевых транзисторов или электрических сенсоров [29]. Данные структуры могут широко применяться при создании приборов опто- и наноэлектроники, а также создания приборов спинтроники [30–33]. Состояние поверхности нанопроволоки может сильно зависеть от концентрации и распределения носителей заряда внутри нанопроволоки. При этом положение уровней размерного квантования внутри объёма нанопроволоках определяется из общего решения системы уравнений Шрёдингера и Пуассона с заданными граничными условиями. Использование полупроводниковых материалов типа АІІІ-ВV для изготовления нанопроволок позволяет путём варьирования геометрии и состава управлять энергетическими свойствами структур.

Материал InAs является весьма перспективным для создания нанопроволок благодаря низкому значению эффективной массы носителей, большой величине g-фактора, а также осо-

бенностям поверхностных состояний. Известно, что при соприкосновении с воздухом на поверхности данного соединения образуются поверхностные состояния большой плотности [49–57]. Благодаря значительному вкладу данных состояний донорного типа, поставляющих носители в объём, нанопроволоки InAs обладают проводимостью n-типа без дополнительного легирования [58–68]. Низкое значение контактного сопротивления нанопроволок является дополнительным подтверждением того, что приповерхностный слой обогащён электронами [59]. При этом свойства электронного газа, образованного в InAs нанопроволоках, в значительной степени определяются особенностями поверхностных состояний и геометрией сечения нанопроволок [58, 67, 69–76].

В текущей литературе присутствуют работы, посвящённые теоретическому и экспериментальному исследованию свойств нанопроволок. Однако ранее, анализ электронного газа, образуемого в данных структурах, проводился на основе цилиндрической модели, которая исключает азимутальную неравномерность распределения носителей. Часть работ посвящена исследованию структур типа «ядро-оболочка» (англ. core-shell), состоящих из гетеропары узкозонного и широкозонного полупроводников [9, 10]. В данных структурах носители концентрируются в т.н. «ядре» нанопроволоки (внутренняя часть), в результате чего исключается влияние поверхностных состояний, пренебрегается влиянием диаметра нанопроволоки и температуры.

В данной главе проведено теоретическое исследование, направленное на изучение образования и свойств электронного газа InAs нанопроволоках с собственной проводимостью и проводимостью n-типа. Используя положение уровня Ферми на поверхности структуры в качестве параметра, учтено влияние поверхностных состояний на основные характеристики структуры. Как будет показано далее, геометрия нанопроволоки, а также состояние поверхности и уровень легирования существенно влияют на характер распределения электронной плотности. Одной из задач было проследить характер изменения от практически равномерного до существенно неравномерного с явно выраженной локализацией электронов в углах поперечного сечения структуры. В данном случае степень локализации оценивалась как отношение концентрации электронов в области рёбер к концентрации в области грани нанопроволоки при различной геометрии и легировании нанопроволоки. Для этого производится численное моделирование энергетического спектра в зависимости от положения уровня Ферми, геометрических характеристик, температуры. Приводится анализ и сравнение с результатами теоретических исследований на основе цилиндрической модели [112] и экспериментальных данных.

3.1.1 Постановка задачи

В данной главе были поставлены следующие цели и задачи:

1. Обобщение алгоритма численного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона, реализованного в рамках главы 2 для нахождения характеристик произвольных структур с двумерным квантованием в продольном магнитном поле.
2. Расчёт энергетического спектра, профилей распределения носителей в нанопроволоках и нанотрубках на основе InAs и InAs/Si в зависимости от геометрических параметров, внешнего затворного напряжения и приложенного магнитного поля
3. Исследование закономерностей образования электронного газа в нанопроволоках и нанотрубках и влияния магнитного поля на энергетический спектр и проводимость данных структур

3.1.2 Исследуемые структуры

Наиболее распространённым способом получения InAs нанопроволок является выращивание методом молекулярно-лучевой эпитаксии на GaAs подложке, покрытой тонким слоем SiO_2 . Вертикальный рост нанопроволок происходит благодаря каталитическому действию капель InAs или Au, предварительно нанесённых на подложку [48]. Выращиваемые данным способом структуры, имеют вид стержней с гексагональным поперечным сечением. Другим методом, используемым для создания структур, является применение газовой фазной эпитаксии. В этом случае вертикальный рост нанопроволок происходит только в отверстиях, нанесённых на слое SiO_2 литографическим методом. Кроме того, метод газовой фазной эпитаксии используется для создания латеральных InAs нанопроволок. В рамках данного метода происходит рост нанопроволок в вытравленной в слое SiO_2 канавке, на основе кремниевой подложки. Форма поперечного сечения данных нанопроволок близка к треугольной.

3.2 Энергетический спектр квантовых нитей, нанопроволок и трубок в приближении эффективной массы

Для описания энергетического спектра квантовых нанопроволок и нанотрубок необходимо использовать частный случай уравнения Шрёдингера (2.1), в котором имеется квантовое ограничение в двух направлениях. В случае с двумерным квантовым ограничением, запишем $V(\vec{r}) = V(x, y)$, т.е. транспорт носителей происходит в направлении свободном от квантования, вдоль оси z . Будем искать решение (2.1) в виде

$$\Psi(\vec{r}) = \exp(ik_z z)\psi(x, y). \quad (3.1)$$

Проведя преобразования, аналогичные рассмотренным в разд. 2.3.1, получим уравнение Шрёдингера для огибающей ВФ $\psi(x, y)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i,j=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(w_{i,j}(x, y) \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(x, y) \right) + V(x, y)\psi(x, y) = E\Psi(x, y). \quad (3.2)$$

где $w_{i,j}(x, y)$ — тензор обратной эффективной массы на плоскости квантового ограничения.

С учётом того, что в работе рассматриваются свойства прямозонных полупроводников на основе материалов типа $A^{III}B^V$ (в частности, InAs, а также твёрдый раствор $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$), в дальнейшем будет рассматриваться случай изотропной эффективной массы, что верно с высокой степенью точности для носителей, населяющих Γ -долину. Кроме того, диэлектрическая проницаемость в данном материале также является изотропной. Таким образом, можно записать:

$$\begin{aligned} w_{i,j}(x, y) &= \delta_{i,j}w(x, y), \\ \varepsilon_{i,j}(x, y) &= \delta_{i,j}\varepsilon(x, y), \end{aligned} \quad (3.3)$$

Для рассматриваемого здесь случая двумерного квантования уравнение Пуассона имеет вид

$$\sum_{i,j=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varepsilon_{i,j}(x, y) \frac{\partial}{\partial x_j} \varphi(x, y) \right) = -\frac{\rho(x, y)}{\varepsilon_0}. \quad (3.4)$$

3.2.1 Пространственная дискретизация уравнения Шрёдингера для случая двумерного квантового ограничения

Аналогично задаче о нахождении спектра для структур с одномерным квантовым ограничением (см. гл. 2), в данной главе для структур с двумерным квантовым ограничением применяется метод конечных разностей. Поскольку исследуемые структуры имеют геометрию поперечного сечения правильного многоугольника, для реализации численной процедуры решения уравнений используется конечно-разностная сетка.

Рассмотрим двумерный оператор кинетической энергии. Будем полагать, что материальные функции, в частности, обратная эффективная масса и диэлектрическая проницаемость изотропны, т.е., выполняются условия (3.3) Тогда:

$$\hat{T}(w)f(x, y) = \left(\frac{\partial}{\partial x} w(x, y) \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} w(x, y) \frac{\partial}{\partial y} \right) f(x, y) = g(x, y). \quad (3.5)$$

Введём дискретную равномерную сетку, построенную на паре неколлинеарных векторов $\vec{v}_1$ и $\vec{v}_2$ (см. рис. 3.1). Для этого будем рассматривать новые безразмерные координаты ξ и η :

$$\vec{r} = \xi \vec{v}_1 + \eta \vec{v}_2. \quad (3.6)$$

Введённые косоугольные координаты меняются дискретно и являются целыми числами: $\xi, \eta \in \mathbb{Z}$. Запишем преобразование следующим образом:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_{1,1} & v_{2,1} \\ v_{1,2} & v_{2,2} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Тогда вид обратного преобразования будет:

$$\xi_i = \sum_j u_{i,j} x_j, \quad (3.8)$$

где $u_{i,j} = (v_{i,j}^T)^{-1}$, $\xi_1 = \xi$, $\xi_2 = \eta$.

Полные производные функции координат $f(x, y)$ с учётом (3.8):

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x} &= \frac{\partial f}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} = u_{1,1} \frac{\partial f}{\partial \xi} + u_{2,1} \frac{\partial f}{\partial \eta}, \\ \frac{\partial f}{\partial y} &= \frac{\partial f}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial f}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} = u_{1,2} \frac{\partial f}{\partial \xi} + u_{2,2} \frac{\partial f}{\partial \eta}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

Перепишем действие оператора кинетической энергии (3.5) в новых координатах с учётом (3.9):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(w \frac{\partial}{\partial x} f \right) &= \\ &= u_{1,1} \left(u_{1,1} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(w \frac{\partial f}{\partial \xi} \right) + u_{2,1} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(w \frac{\partial f}{\partial \xi} \right) \right) + \\ &+ u_{2,1} \left(u_{1,1} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(w \frac{\partial f}{\partial \eta} \right) + u_{2,1} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(w \frac{\partial f}{\partial \eta} \right) \right), \\ \frac{\partial}{\partial y} \left(w \frac{\partial}{\partial y} f \right) &= \\ &= u_{1,2} \left(u_{1,2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(w \frac{\partial f}{\partial \xi} \right) + u_{2,2} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(w \frac{\partial f}{\partial \xi} \right) \right) + \\ &+ u_{2,2} \left(u_{1,2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(w \frac{\partial f}{\partial \eta} \right) + u_{2,2} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(w \frac{\partial f}{\partial \eta} \right) \right). \end{aligned} \quad (3.10)$$

Таким образом, было получено действие оператора кинетической энергии на произвольную функцию в косоугольных координатах.

Выражение (3.5) также может быть записано в косоугольных координатах:

$$\vec{\nabla}_\xi \tilde{w} \vec{\nabla}_\xi f(\xi, \eta) = f(\xi, \eta), \quad (3.11)$$

где $\vec{\nabla}_\xi$ — двумерный оператор набла в косоугольных координатах (ξ, η) , $\tilde{w}$ — матрица 2×2 , получаемая из матрицы преобразования $u_{i,j}$ и обратной эффективной массы w путём подстановки (3.9) в (3.10).

Применим к (3.11) процедуру дискретизации, аналогичную рассматриваемой в разд. ???. Пусть ξ и η — целые числа. Тогда плоскость квантового ограничения в косоугольных координатах делится на ячейки со сторонами, равными единице (см. рис. 3.1).

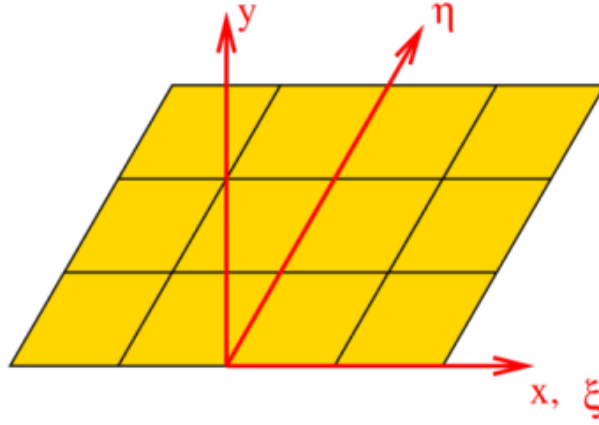


Рис. 3.1. Соотношение косоугольных и декартовых координат в используемой конечно-разностной схеме

Проинтегрируем (3.11) по объёму и применим теорему Остроградского-Гаусса:

$$\oint_S \tilde{w}(\xi, \eta) \vec{\nabla}_\xi f(\xi, \eta) d\vec{S} = \iiint_V g(\xi, \eta) dV. \quad (3.12)$$

Учитывая двумерность задачи на рассматриваемой сетке, левая часть (3.12) для ячейки с индексами (ξ, η) складывается из потока векторного поля $\tilde{w}(\xi, \eta) \vec{\nabla}_\xi f(\xi, \eta)$ через четыре поверхности раздела с соседними ячейками с индексами $(\xi \pm 1, \eta)$ и $(\xi, \eta \pm 1)$.

При малом изменении $f(\xi, \eta)$ и $g(\xi, \eta)$ в пределах ячейки производные в выражении (3.12) преобразуются в конечные разности, в то время как объёмный интеграл сводится к произведению значения функции $g(\xi, \eta)$ на объём ячейки $V = a_\xi a_\eta l_z = l_z$:

$$\begin{aligned}
& \oint_S \tilde{w}(\xi, \eta) \vec{\nabla}_\xi f(\xi, \eta) d\vec{S} \approx \\
& \approx a_\xi l_z w(\xi, \eta + \frac{a_\eta}{2}) \frac{f(\xi, \eta + a_\eta) - f(\xi, \eta)}{a_\eta} + a_\xi l_z w(\xi, \eta - \frac{a_\eta}{2}) \frac{f(\xi, \eta - a_\eta) - f(\xi, \eta)}{a_\eta} + \\
& + a_\eta l_z w(\xi + \frac{a_\xi}{2}, \eta) \frac{f(\xi + a_\xi, \eta) - f(\xi, \eta)}{a_\xi} + a_\eta l_z w(\xi - \frac{a_\xi}{2}, \eta) \frac{f(\xi - a_\xi, \eta) - f(\xi, \eta)}{a_\xi}, \\
& \iiint_V g(\xi, \eta) dV \approx g(\xi, \eta) a_\xi a_\eta l_z,
\end{aligned} \tag{3.13}$$

где a_ξ, a_η — шаги дискретной сетки по косоугольным координатам, равные единице.

С учётом (3.13) и (3.10) дискретная форма выражения действия оператора кинетической энергии (3.5) имеет вид

$$\sum_{\xi', \eta'} T_{\xi, \eta, \xi', \eta'}(w) f(\xi', \eta') = g(\xi, \eta), \tag{3.14}$$

где матрица дискретного оператора кинетической энергии $T(w)_{i,j,k,l}$ записывается как

$$\begin{aligned}
T(w)_{i,j,k,l} = & Aw_{i+\frac{1}{2},j} \delta_{i+1,k} \delta_{j,l} + Aw_{i-\frac{1}{2},j} \delta_{i-1,k} \delta_{j,l} + \\
& + Bw_{i,j+\frac{1}{2}} \delta_{i,k} \delta_{j+1,l} + Bw_{i,j-\frac{1}{2}} \delta_{i,k} \delta_{j-1,l} - \\
& - (A(w_{i+\frac{1}{2},j} + w_{i-\frac{1}{2},j}) + B(w_{i,j+\frac{1}{2}} + w_{i,j-\frac{1}{2}})) \delta_{i,k} \delta_{j,l} + \\
& + \Delta(w_{i,j+1} + w_{i+1,j}) \delta_{i+1,k} \delta_{j+1,l} - \Delta(w_{i,j-1} + w_{i+1,j}) \delta_{i+1,k} \delta_{j-1,l} - \\
& - \Delta(w_{i,j+1} + w_{i-1,j}) \delta_{i-1,k} \delta_{j+1,l} + \Delta(w_{i,j-1} + w_{i-1,j}) \delta_{i-1,k} \delta_{j-1,l},
\end{aligned} \tag{3.15}$$

где $A = u_{1,1}^2 + u_{1,2}^2$, $B = u_{2,1}^2 + u_{2,2}^2$ и $\Delta = \frac{1}{4}(u_{1,1}u_{2,1} + u_{1,2}u_{2,2})$, а нижний индекс у материального коэффициента w соответствует номеру ячейки на координатной косоугольной сетке.

С учётом выражений для оператора кинетической энергии (3.14) и (3.15), дискретный вид уравнения Шрёдингера выглядит, как:

$$\sum_{k,l} \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} T_{i,j,k,l}(w) + \delta_{i,k} \delta_{j,l} V(\vec{r}_{i,j}) \right) \psi(\vec{r}_{k,l}) = E \psi(\vec{r}_{i,j}), \tag{3.16}$$

где $\vec{r}_{i,j}$ — вектор на дискретной сетке.

Действие оператора потенциальной энергии на функцию сводится к умножению на символы Кронекера.

Далее сопоставим каждой паре индексов (i, j) на рассматриваемой дискретной сетке один индекс α , который можно интерпретировать как номер узла сетки. Тогда при замене пар индексов $(i, j) \rightarrow \alpha$, $(k, l) \rightarrow \beta$ выражение (3.16) записывается как:

$$\sum_{\beta} \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} T_{\alpha,\beta}(w) + \delta_{\alpha,\beta} V(\vec{r}_{\alpha}) \right) \psi(\vec{r}_{\alpha}) = \sum_{\beta} H_{\alpha,\beta} \psi(\vec{r}_{\beta}) = E \psi(\vec{r}_{\alpha}). \quad (3.17)$$

Таким образом, задача о нахождении энергетического спектра, описываемого энергией размерного квантования E и двумерными огибающими ВФ $\psi(\vec{r}_{\alpha})$ сводится к нахождению собственных значений и векторов для матрицы $H_{\alpha,\beta}$.

3.2.2 Дискретизация двумерного оператора кинетической энергии в магнитном поле

Предположим, что исследуемые структуры помещены в однородное магнитное поле. Тогда оператор импульса приобретает дополнительное слагаемое с векторным потенциалом и имеет следующий вид в координатном представлении:

$$\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - e \vec{A}. \quad (3.18)$$

В работе рассматривается исключительно случай для магнитного поля $\vec{B}$, направленного вдоль оси свободного транспорта носителей z , т.е. $B = B_z$. В этом случае представляется удобным выбор симметричной калибровки для векторного потенциала $\vec{A}$:

$$\vec{A} = \frac{B}{2} \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

В результате подстановки (3.18) и (3.19) в (2.2) получаем вид оператора кинетической энергии для систем с продольным магнитным полем:

$$\begin{aligned} \hat{T} &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} - e A_{\alpha} \right) w(x, y) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} - e A_{\alpha} \right) = \\ &= - \sum_{\alpha} \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} w(x, y) \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} - \sum_{\alpha} \frac{e \hbar A_{\alpha}}{2i} \frac{\partial w(x, y)}{\partial x_{\alpha}} + \\ &+ \sum_{\alpha} \frac{e \hbar B w(x, y)}{2i} \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) + \sum_{\alpha} \frac{e^2 B^2 w(x, y)}{8} (x^2 + y^2) \end{aligned} \quad (3.20)$$

Очевидно, что первое слагаемое тождественно оператору кинетической энергии без магнитного поля, т.е., первому слагаемому (3.2). В приближении кусочно-постоянной обратной эффективной массы второе слагаемое будет равно нулю. Таким образом, введение магнитного поля приводит к добавлению в уравнение Шрёдингера двух дополнительных слагаемых. Одно из

них имеет вид потенциальной энергии. Третье слагаемое, имеющее вид дифференциального оператора, может быть записано через оператор проекции момента количества движения на ось z :

$$\frac{1}{2i}e\hbar Bw(x,y)\left(y\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial y}\right)=-\frac{1}{2}eBw(x,y)\hat{L}_z. \quad (3.21)$$

3.3 Решение двумерного дискретного уравнения Пуассона для полупроводниковых нанопроволок

Применим описанную выше процедуру дискретизации для решения уравнения Пуассона (3.4). Очевидно, что левая часть представляет собой действие оператора кинетической энергии. Тогда дискретный вид уравнения Пуассона записывается, как

$$\sum_{k,l} T(\varepsilon)_{i,j,k,l} \varphi(\vec{r}_{k,l}) = -\frac{\rho(\vec{r}_{i,j})}{\varepsilon_0} \quad (3.22)$$

С использованием рассмотренной выше замены пар индексов на индексы узлов сетки $(i,j) \rightarrow \alpha$, $(k,l) \rightarrow \beta$ выражение (3.22) записывается как

$$\sum_{\alpha} T(\varepsilon)_{\alpha,\beta} \varphi(\vec{r}_{\beta}) = -\frac{\rho(\vec{r}_{\alpha})}{\varepsilon_0}. \quad (3.23)$$

Для получения выражения для плотности электростатического заряда $\rho(x,y)$ рассмотрим квантовую концентрацию электронов в системах с двумерным квантовым ограничением. Аналогично разд. ??, она может быть выражена следующим образом:

$$n = \int_{E_C}^{+\infty} g(E) f_0(E) dE. \quad (3.24)$$

Для систем с двумерным квантовым ограничением с параболическим законом дисперсии (см. разд. 1.2.2) плотность состояний имеет вид:

$$g_{1D} = \frac{\sqrt{2m_{\text{DOS}}L_x}}{\pi\hbar} \sum_i \frac{\Theta(E-E_i)}{\sqrt{E-E_i}}. \quad (3.25)$$

Подставляя (3.25) в (3.24), получим вид выражения для квантовой концентрации в системах с двумерным квантовым ограничением [38]:

$$n(x,y) = \sqrt{\frac{2m_{\text{DOS}}k_B T}{\pi\hbar^2}} \sum_i |\Psi_i^2(x,y)|^2 \mathcal{F}_{-frac{1}{2}}\left(\frac{E_F-E_i}{k_B T}\right). \quad (3.26)$$

Аналогично электростатической задаче для квантовых ям (см. разд. ??), можно считать, что плотность заряда $\rho(\vec{r})$ не зависит от электростатического потенциала $\varphi(\vec{r})$. Тогда решение уравнения Пуассона равносильно решению неоднородной линейной системы. В общем случае, задача является нелинейной и для получения самосогласованного решения уравнений Шрёдингера (3.17) и Пуассона (3.23) применяются аналогичные рассмотренным для квантовых ям методы релаксационных множителей и ньютоновской линеаризации. Метод релаксационных множителей для задачи о квантовых нитях полностью аналогичен соответствующему методу для квантовых ям. Для метода ньютоновской линеаризации за счёт отличий в виде выражения для квантовой концентрации производная квантовой концентрации, входящая во второе слагаемое якобиана (2.29) будет иметь следующий вид:

$$\frac{\partial n_{1D}(x, y)}{\partial \varphi} = \frac{e}{\hbar} \sqrt{\frac{2m^*}{\pi kT}} \sum_i |\Psi_i^2(x, y)| \mathcal{F}_{-3/2} \left(\frac{E_f - E_i}{kT} \right), \quad (3.27)$$

где i — номер подзоны размерного квантования.

3.4 Спектр и распределение носителей в нанопроволоках гексагонального и треугольного поперечного сечения

3.4.1 Модель исследуемых структур

В работе рассматриваются нанопроволоки на основе прямозонного материала InAs, производится численное моделирование их энергетического спектра размерного квантования, а также распределения плотности носителей и электростатического потенциала. Для процедуры численного моделирования сделаны следующие предположения об исследуемых структурах:

- **Бесконечная длина.** Предполагается, что длина нанопроволоки значительно превосходит по размерам её поперечное сечение, что позволяет утверждать, что её свойства определяются решением задачи на площади поперечного сечения.
- **Кристаллическая решётка цинковой обманки (сфалерит).** В силу предыдущего пункта предполагается отсутствие дефектов упаковки, приводящих к наличию в нанопроволоке фаз различных кристаллических решёток (сфалерит и вюрцит [63]). Предполагается, что рассматриваемые структуры имеют кристаллическую решётку сфалерита, соответствующую объёмному InAs. Рассматриваемый тип решётки определяет такие параметры расчёта, как используемые значения эффективной массы электрона, разрывы зон и пр.

- **Размеры.** В работе рассматриваются нанопроволоки с диаметром поперечного сечения 40–120 нм.
- **Плотность поверхностных состояний.** Предполагается, что плотность поверхностных состояний в рассматриваемых структурах $N_S \sim 10^{12} \text{см}^{-2}$. При помощи граничных условий для уравнения Пуассона в моделируемых структурах создаётся эффект пиннинга уровня Ферми, положение которого для данного значения плотности поверхностных состояний составляет 160 мэВ выше края зоны проводимости.

3.4.2 Особенности энергетического спектра нанопроволок с симметричным потенциалом

В качестве тестовой задачи рассматриваются нанопроволоки, имеющие квадратное поперечное сечение и равный нулю электростатический потенциал. Для подобных структур задача о нахождении энергетического спектра и может быть решена как аналитически, так и численно, что позволяет использовать данную задачу для верификации численного метода.

Аналитическое решение задачи изложено в [113]. Пусть квадратная нанопроволока шириной L , занимает интервал: $x \in [0; L], y \in [0; L]$. Тогда потенциальная энергия V в пределах проволоки равна нулю, за пределами проволоки — бесконечности. В приближении бесконечной по глубине потенциальной ямы на ВФ накладываются граничные условия:

$$\Psi(x = 0, y) = 0, \Psi(x = L, y) = 0, \Psi(x, y = 0) = 0, \Psi(x, y = L) = 0. \quad (3.28)$$

Тогда решением уравнения Шрёдингера (3.2) с учётом граничных условий (3.28) является ВФ вида

$$\Psi_{n,m}(x, y) = \sin\left(x \frac{\pi n}{L}\right) \sin\left(y \frac{\pi m}{L}\right), \quad (3.29)$$

где квантовым числам n и m отвечает энергия $E_{n,m}$:

$$E_{n,m} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 (n^2 + m^2), \quad (3.30)$$

где m^* — эффективная масса электрона.

На рис. 3.2 показано сравнение аналитического решения (3.30) с результатами численного моделирования. Результаты хорошо согласуются. Также показана зависимость ошибки расчётного положения основного состояния от шага конечно-разностной сетки. Анализ проводился

для двух различных ориентаций границы ячейки: с границей в направлении типа (1 0), и с границей в направлении (1 1). Рассмотрение различных ориентаций необходимо ввиду того, что для сеток, описывающих нанопроволоки гексагонального и треугольного сечения используются оба типа ориентации границы (см. рис. 3.3). Как показывают данные тестовые расчёты, ошибка определения основного состояния монотонно падает с уменьшением шага сетки. Таким образом, показана стабильность работы численной модели, а также определён допустимый диапазон шага сетки для пространственной дискретизации (шаг сетки ~ 1 обеспечивает точность расчёта спектра ~ 2).

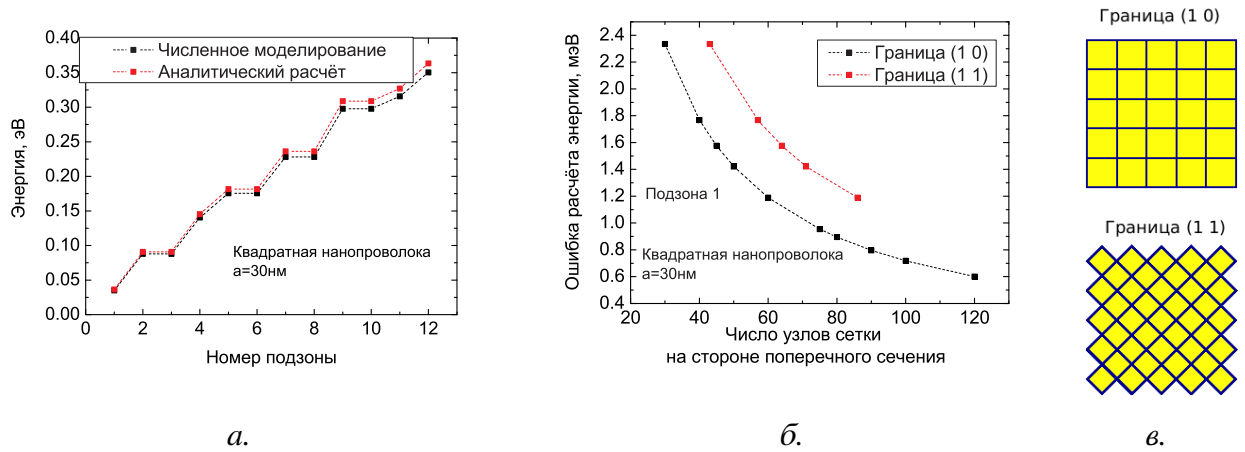


Рис. 3.2. Сравнение полученного в результате численного расчёта энергетического спектра с аналитическим (а.), зависимость ошибки вычисления энергии первой подзоны размерного квантования от числа узлов сетки на стороне поперечного сечения (б.) и схема различных границ для дискретизации квадратного поперечного сечения (в.)

Далее рассмотрим энергетический спектр симметричных нанопроволок с треугольным и гексагональным поперечным сечением. Для структур с рассматриваемой геометрией используется конечно-разностная сетка с ячейкой, имеющей форму параллелограмма. На рис. 3.3 показана схема дискретизации для обоих типов структур. В работе проводилось моделирование спектров данных структур в зависимости от геометрии и легирования, однако данные факторы не влияют на качественный вид распределения состояний размерного квантования в структурах. На рис. 3.4 показаны примеры спектров размерного квантования для нанопроволок с треугольной и гексагональной формой поперечного сечения.

С одной стороны, структуры различной формы демонстрируют различное поведение спектра. В частности, в треугольных структурах при равенстве диаметров нанопроволоки присутствует большее квантовое ограничение, и, как следствие, расстояние между уровнями ста-

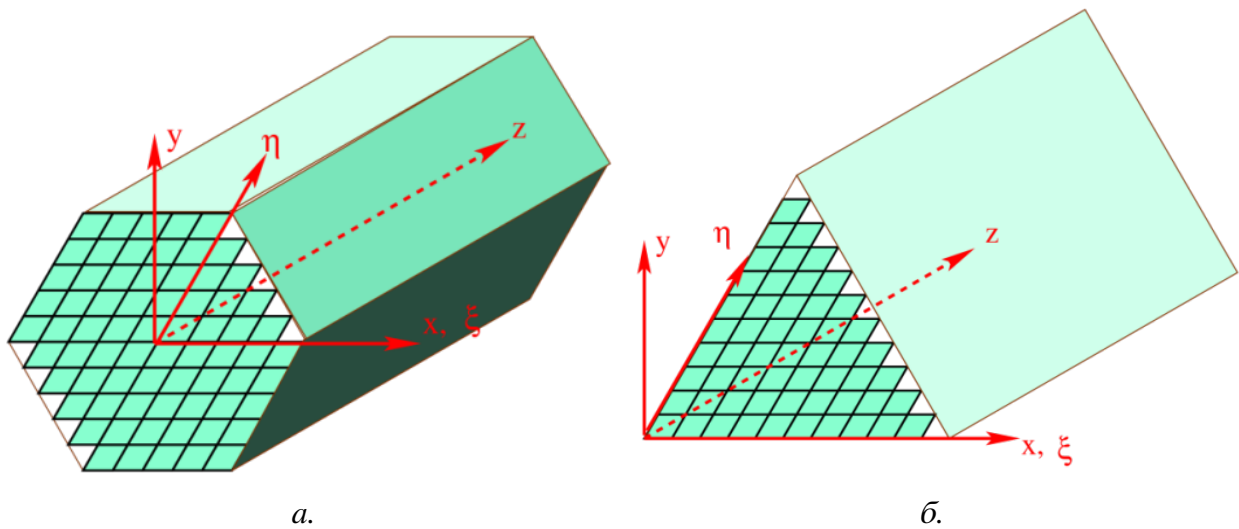


Рис. 3.3. Схема дискретизации исследуемых структур гексагонального (а.) и треугольного (б.) поперечного сечения

новится более разреженным.

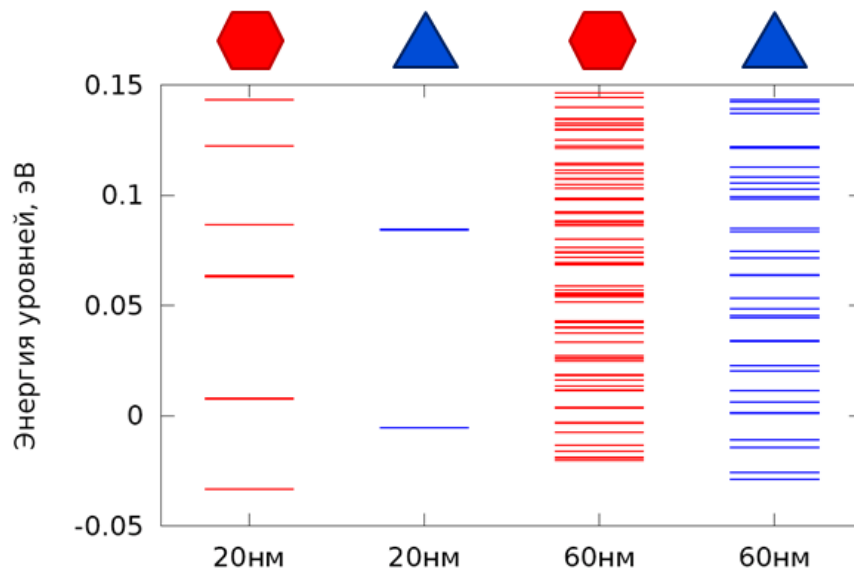


Рис. 3.4. Уровни размерного квантования в гексагональных и треугольных нанопроволоках различного размера

Оба типа спектра имеют состояния с одно- и двукратным вырождением. Можно заметить, что такой характер вырожденных состояний имеет и спектр нанопроволоки квадратного сечения, что очевидно из аналитического выражения (3.30): для любой пары неравных кванто-

вых чисел (n, m) всегда существует состояние с той же энергией, описываемое парой (m, n) , что соответствует случаю двукратного вырождения. В то же время состояния с равными квантовыми числами однократно вырождены.

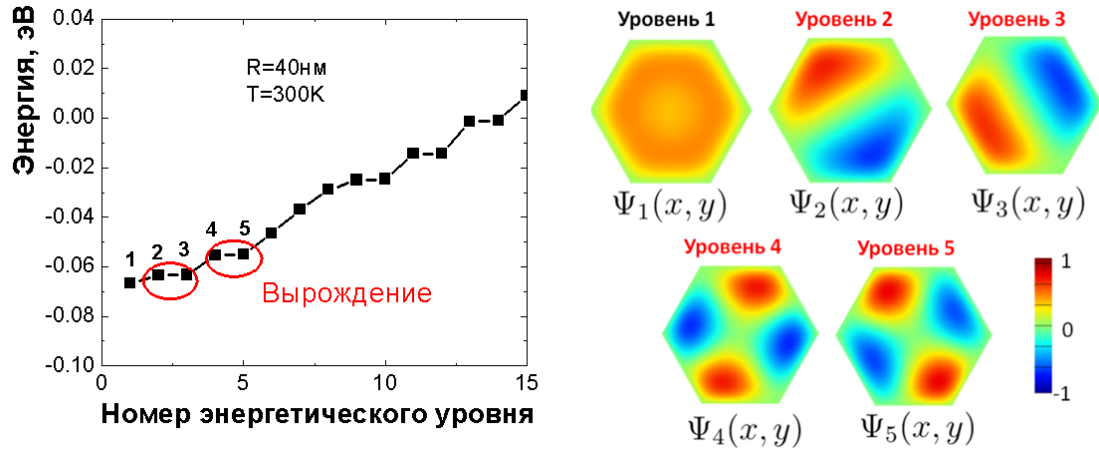


Рис. 3.5. Общий вид энергетического спектра и подзон размерного квантования гексагональных нанопроволок

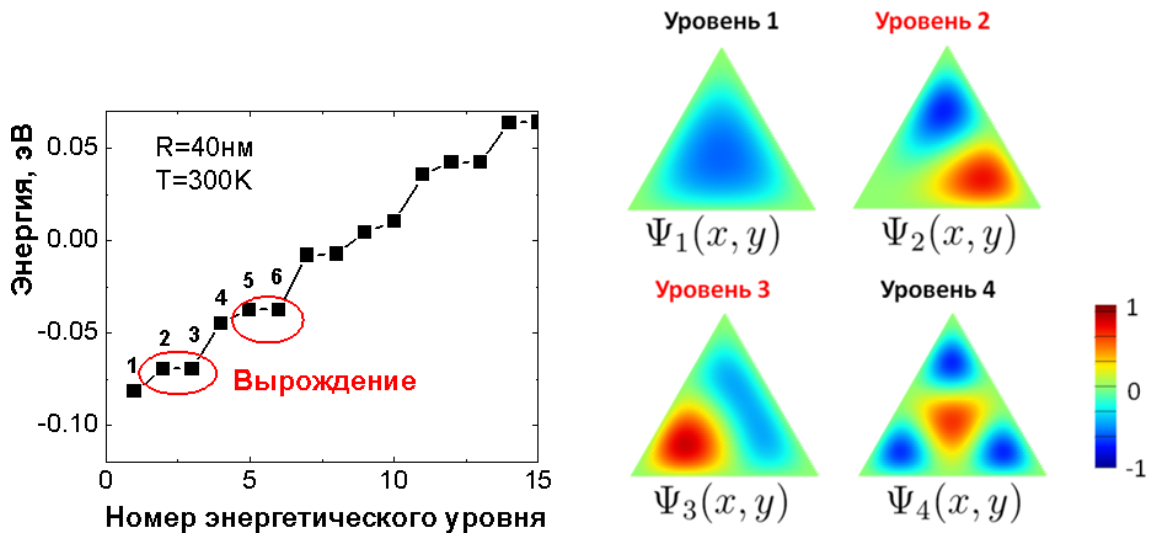


Рис. 3.6. Общий вид энергетического спектра и подзон размерного квантования треугольных нанопроволок

Рассматривая результаты численного моделирования огибающих ВФ (рис. 3.5, 3.6) можно заметить, что рассматриваемые отдельно состояния из вырожденной пары не обладают элементами симметрии поперечного сечения нанопроволоки, такими, как оси и плоскости симмет-

рии. Данными свойствами обладает только суммарная плотность вероятности, соответствующая данной энергии размерного квантования $E_n = E_m$ (см. рис. 3.7).

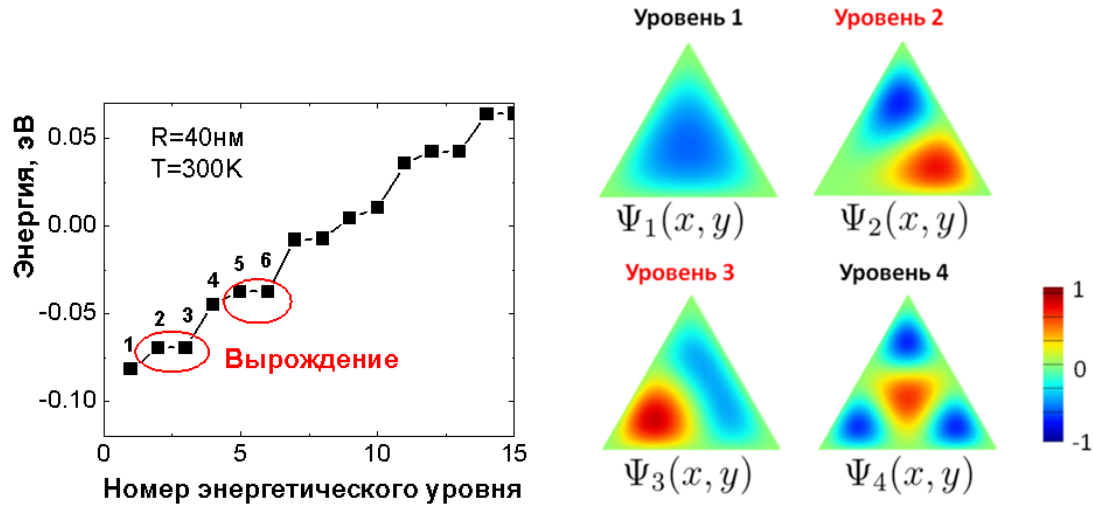


Рис. 3.7. Вырожденные подзоны размерного квантования в треугольных нанопроволоках и их линейные комбинации

С другой стороны, поскольку любая линейная комбинация огибающих ВФ из вырожденной пары является решением уравнения Шрёдингера, в работе были подобраны коэффициенты, соответствующие результатам численного решения, но подвергнутые преобразованию поворота вокруг центральной оси поперечного сечения (см. рис. 3.7).

3.5 Распределение концентрации в нанопроволоках с правильным гексагональным поперечным сечением

Основные особенности распределения электронов в поперечном сечении нанопроволоки определяются плотностью поверхностных состояний. На рис. 3.8 показано распределение электронной плотности для различных значений уровня Ферми по отношению к уровню нейтральности в нанопроволоке с собственным типом проводимости. В случае большого удаления уровня Ферми от уровня нейтральности (что соответствует малой плотности поверхностных состояний), профиль зоны проводимости имеет практически плоскую форму (рис. 3.8a). В этом случае электроны сосредоточены в центре нанопроволоки с центром распределения, расположенным на оси нанопроволоки.

Электрическое поле, индуцированное положительным зарядом доминирующих донорных поверхностных состояний, растёт с увеличением плотности поверхностных состояний. В резуль-

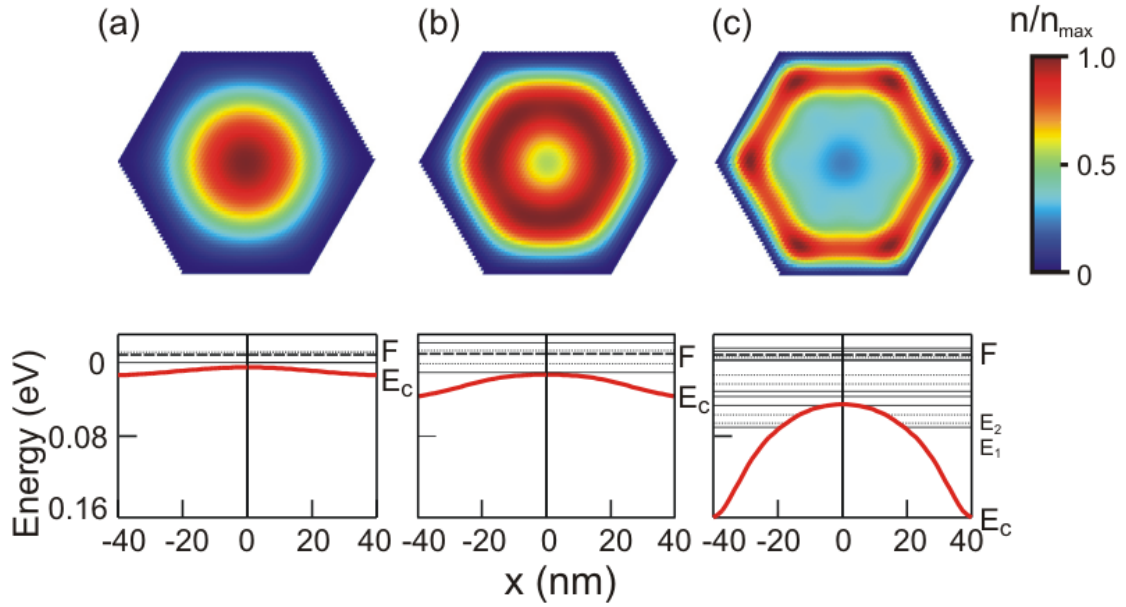


Рис. 3.8. Распределение электронной плотности в InAs нанопроволоке с радиусом 40 нм для уровня Ферми, расположенного на 20 мэВ (а.), 40 мэВ (б.) и 160 мэВ (в.) выше края зоны проводимости, а также профили зоны проводимости вместе с уровнями размерного квантования для указанных значений положения уровня Ферми

тате происходит изгиб зоны проводимости вниз с одновременным перераспределением электронной плотности, которая приобретает цилиндрическую форму (рис. 3.8б). При ещё большем увеличении плотности поверхностных состояний (при фиксировании уровня Ферми на уровне нейтральности) распределение остаётся цилиндрическим, однако при этом также формируются зоны повышенной концентрации электронов вблизи углов поперечного сечения нанопроволоки (рис. 3.8в).

Ранее в качестве причины неравномерного углового распределения указывалась форма волновой функции основного состояния размерного квантования [10], либо интерпретировалось как кулоновское отталкивание между квазичастицами, которое способствовало увеличению расстояния между частицами [9]. В данной работе производится более подробное исследование данного эффекта. На рис. 3.9а показаны сечения профиля зоны проводимости в направлениях к ребру и середине грани нанопроволоки. Сечения профиля зоны проводимости могут рассматриваться как треугольные квантовые ямы для электронов. Их ширина определяется длиной стороны нанопроволоки, в то время как глубина зависит от положения уровня Ферми, которое, в свою очередь, определяется плотностью поверхностных состояний. Рассмотрим данные две квантовые ямы независимо друг от друга. Квантовая яма углового сечения шире по срав-

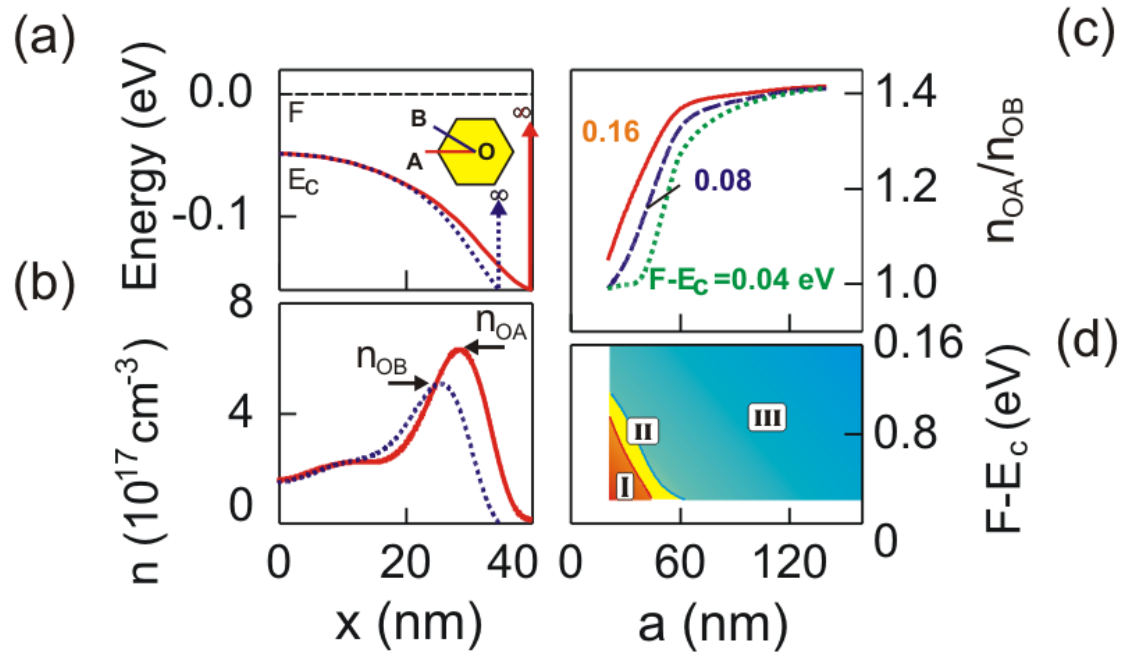


Рис. 3.9. Сечение профиля зоны проводимости в направлении ОА к углу поперечного сечения (сплошная линия) и в направлении ОВ к середине грани нанопроволоки (штриховая линия) для i-InAs нанопроволоки с $a = 40$ нм при $T = 4$ К (а.), сечение электронной плотности для данной нанопроволоки в направлениях ОА и ОВ (б.), оценка степени локализации n_{OA}/n_{OB} для данной нанопроволоки и различных положений уровня Ферми (с); двумерная диаграмма, показывающая характер распределения электронной плотности в зависимости от размера нанопроволоки и степени легирования: I – носители сосредоточены в центре, II – цилиндрическое распределение носителей, III – цилиндрическое распределение с локализацией носителей в углах поперечного сечения

нению с КЯ, образуемой сечением середины грани. Таким образом, энергетические состояния размерного квантования в угловой КЯ будут иметь меньшую энергию, и соответственно, большую заселённость носителями. Как можно видеть, поперечное сечение нанопроволоки может рассматриваться как суперпозиция множества КЯ с шириной, меняющейся в пределах двух рассмотренных выше сечений (угловая КЯ и КЯ сечения к середине грани). Однако электронный газ образуется преимущественно в энергетически более выгодных областях, т.е. углах поперечного сечения нанопроволоки, как показано на рис. 3.9б.

На рис. 3.9с показано отношение максимальной электронной плотности на рассмотренных выше сечениях нанопроволоки в зависимости от ширины стороны a нанопроволоки. Отношение электронных плотностей растёт с ростом ширины a , что объясняется ростом абсолют-

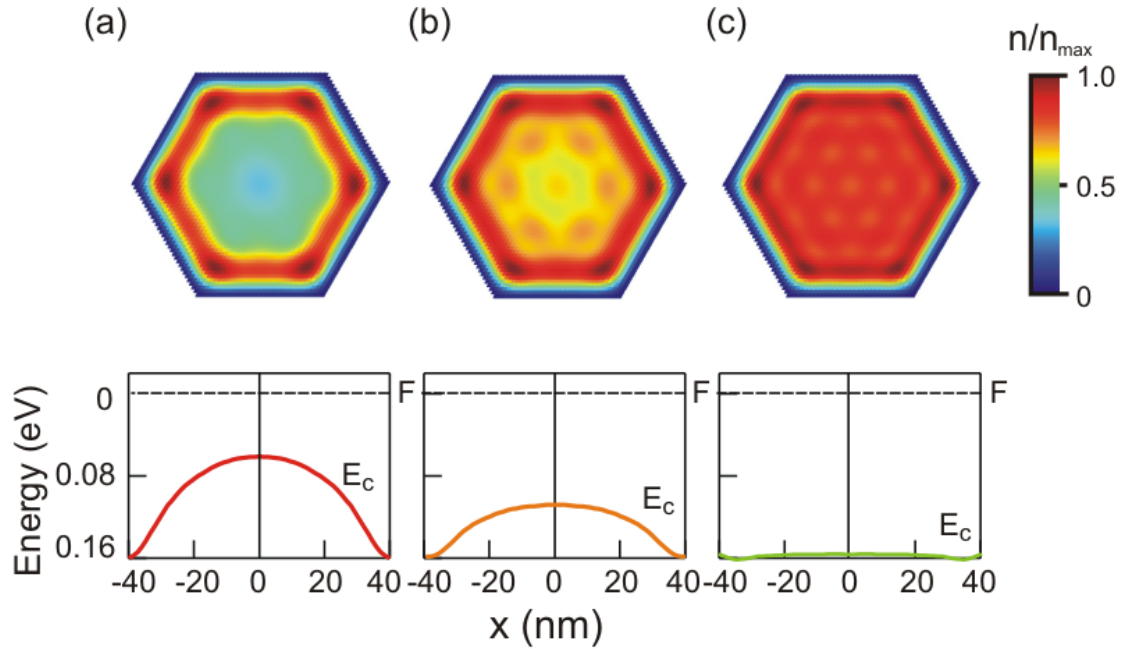


Рис. 3.10. Распределение электронной плотности в InAs нанопроволоке с радиусом 40 нм для уровня Ферми 160 мэВ для различных значений степени донорного легирования: $5 \times 10^{17} \text{см}^{-3}$ (a), 10^{18}см^{-3} (b) и $2 \times 10^{18} \text{см}^{-3}$ (c); $T = 4 \text{К}$ и соответствующие им профили зоны проводимости

ной разности в значениях ширины квантовых ям, образованных на этих сечениях. Аналогичный эффект наблюдается при увеличении относительного положения уровня Ферми ($E_F - E_C$), поскольку оно способствует большему изгибу зон, т.е. более выраженным квантовым ямам вблизи поверхности нанопроволоки.

Таким образом, области, обогащённые электронами образуются преимущественно в нанопроволоках с большим размером поперечного сечения и высокой плотностью поверхностных состояний (рис. 3.9с). Однако разница в отношении электронной плотности между ребром и серединой грани нанопроволоки для всех рассматриваемых случаев не превышает 40%. Следовательно, соседние обогащённые электронами угловые области всегда сильно связаны друг с другом независимо от свойств и состояния поверхности нанопроволоки. Расчёты, проведённые для комнатной температуры, показывают аналогичные результаты для рассматриваемых отношений электронной плотности, что позволяет сделать вывод о слабом влиянии температуры на распределение носителей. На рис. 3.9d сведены основные результаты моделирования распределения электронов в данных структурах. Видно, что основной характер распределения электронов в нанопроволоках является цилиндрическим с различной выраженностью населённости носителями рёбер нанопроволоки. Два типа распределения, отличающиеся от цилиндрического, образуются только в относительно тонких нанопроволоках с малой плотностью поверхностных

состояний.

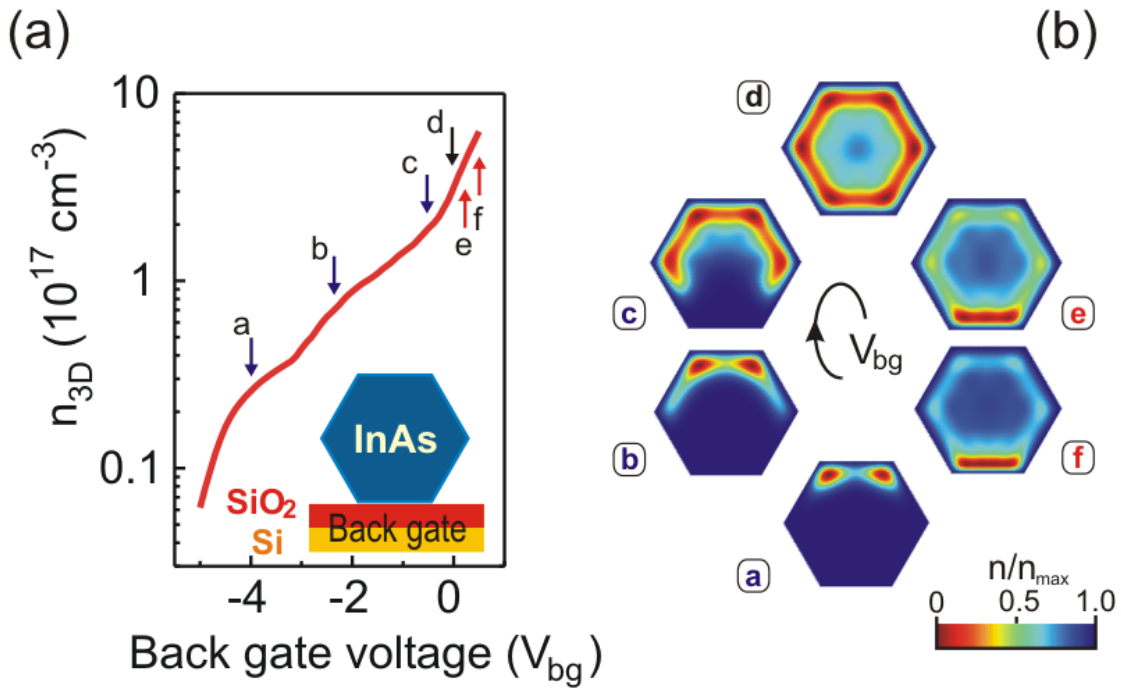


Рис. 3.11. Средняя электронная плотность в зависимости от приложенного напряжения к электроду на нижней грани для InAs нанопроволоки со стороной $a = 40$ нм для положения уровня Ферми 160 мэВ при $T=4$ К (a) и двумерные распределения электронной плотности для нескольких характерных значений напряжения (b)

Дополнительное легирование объёма нанопроволоки примесью n-типа приводит к выпрямлению профиля зоны проводимости. На рис. 3.10a-c показано, что при изменении концентрации донорного легирования в пределах от $5 \times 10^{17} \text{см}^{-3}$ до $2 \times 10^{18} \text{см}^{-3}$ происходит изменение формы сечения профиля зоны проводимости от треугольной до прямоугольной, что ослабляет обогащение углов структуры электронами и приводит к их равномерному распределению в объёме поперечного сечения нанопроволоки (рис. 3.10c).

В данной работе показана возможность управления распределением электронов при помощи внешнего приложенного электрического напряжения. Пусть к высоколегированной кремниевой подложке, отделённой от нанопроволоки слоем диоксида кремния приложен электрод, задающий внешний электростатический потенциал (рис. 3.11). Было проведено моделирование влияния данного электрода путём изменения граничного условия Дирихле на потенциал в уравнении Пуассона, а именно, к потенциалу на границе нанопроволоки добавляется потенциал затвора V_{bg} . Для оценки изменения распределения электронов вычислялась средняя электронная

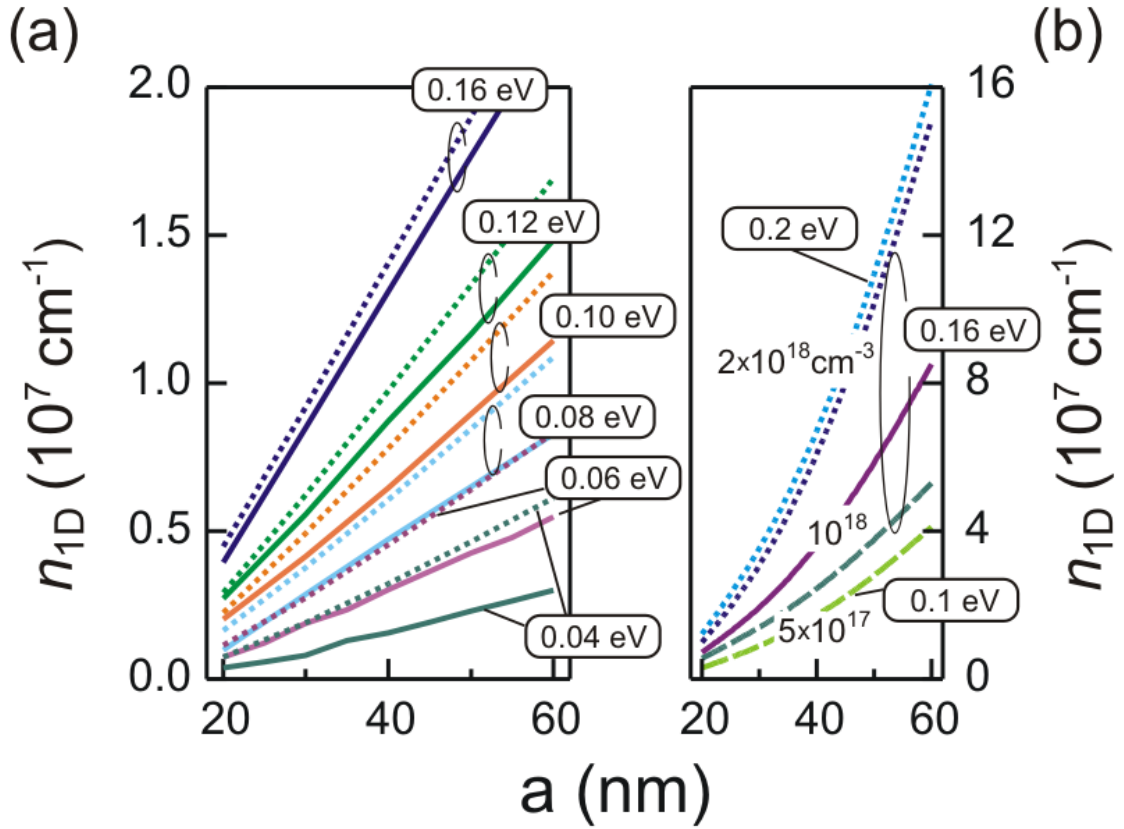


Рис. 3.12. Средняя одномерная электронная плотность в зависимости от радиуса нанопроволоки для различных значений положения уровня Ферми для температуры $T = 4 \text{ K}$ (сплошная линия) и 300 K (штриховая линия) (а.); средняя одномерная электронная плотность в зависимости от радиуса нанопроволоки для различных значений уровня легирования при $T = 4 \text{ K}$. (б.)

плотность в объёме нанопроволоки: $n_{3D} = \iint_S n(x, y) dx dy / S$.

На рис. 3.11 показана зависимость средней электронной плотности n_{3D} от приложенного затворного напряжения. Полученная зависимость имеет различные ступенчатые особенности, соответствующие постепенному обеднению нанопроволоки с ростом напряжения. Как видно на результатах, показанных на рис. 3.11b, электрическое поле, образуемое приложенным затворным потенциалом, способствует сдвигу электронной плотности к верхней части структуры с одновременным обеднением призатворной области, что приводит к уменьшению общего количества носителей в структуре. Электронная плотность спадает сильнее для напряжений, соответствующих угловым областям обогащения электронами. Подобно результатам [9] обогащённые электронами области присутствуют в нанопроволоке и после обеднения, хотя их выраженность снижается. При этом приложение положительного напряжения приводит к сильному обогащению в призатворной области нанопроволоки со слабым изменением картины распределения носите-

лей в остальной части поперечного сечения структуры.

Для оценки влияния ширины нанопроволоки в данной работе вычисляется средняя одномерная концентрация электронов, как $n_{1D} = S n_{3D}$.

На рис. 3.12 показаны зависимости средней одномерной концентрации от размера нанопроволоки для различных положений уровня Ферми. Электронная плотность растёт с ростом ширины нанопроволоки. Очевидно, рост ширины нанопроволоки уменьшает энергию и увеличивает количество состояний размерного квантования, населённых электронами. Линейное поведение зависимости определяется требованием электронейтральности нанопроволоки (общий заряд электронов в объёме нанопроволоки равен заряду ионизованных донорных поверхностных состояний).

Таким образом, средняя одномерная электронная плотность n_{1D} определяется как $n_{1D} \sim a N_{sd}$, где N_{sd} — двумерная плотность донорных поверхностных состояний. На рис. 3.12 показано, что также понижение положения края зоны проводимости от 0 до 160 мэВ приводит к увеличению электронной плотности благодаря донорным состояниям на поверхности нанопроволоки. Увеличение температуры оказывает слабое влияние на электронную плотность при уровне Ферми вблизи уровня нейтральности ($E_F - E_C = 160$ мэВ), в то время как при его сдвиге до значений $E_F - E_C < 60$ мэВ электронная плотность увеличивается более чем на 30% при изменении температуры в пределах 4–300 К. Данный факт объясняется влиянием потенциала, способствующим квантовому ограничению электронов в нанопроволоке. Действительно, для случая уровня Ферми, удалённого от уровня нейтральности, потенциал образует сравнительно неглубокую треугольную или даже плоскую яму для электронов (рис. 3.10). Это приводит к большей густоте уровней размерного квантования по сравнению с ярко выраженным треугольным потенциалом нанопроволоки, соответствующим положению уровня Ферми вблизи уровня нейтральности. Очевидно, что для случая высокой температуры размытие распределения Ферми-Дирака выше и, таким образом, в нанопроволоке с плоским потенциалом большее количество состояний оказывается населёнными носителями заряда. Это, в свою очередь, приводит к большему абсолютному изменению в электронной плотности. Для того чтобы выявить соответствие результатов моделирования с экспериментальными данными, производится сравнение с результатами работы [67]. Данные измерения были выполнены с использованием конфигурации, использующей затворный электрод на подложке. Как было показано в [114], результаты измерений могут быть существенно преувеличенными. В соответствии с выводами [114], полученные экспериментально значения были скорректированы в предположении, что они отличаются от более точных измерений методом Холла в 4 раза. Также учтён тот факт, что под влиянием внешних условий может происходить изменение плотности поверхностных состояний, что,

в свою очередь, приводит к смещению уровня Ферми. Однако, как можно видеть, полученные в эксперименте значения электронной плотности ниже результатов моделирования для уровня Ферми на 160 мэВ выше края зоны проводимости.

Данное расхождение не может быть напрямую проинтерпретировано как связанное с присутствием поверхностных акцепторных состояний. Это связано с тем, что для плотности поверхностных состояний $5 \times 10^{12} \text{см}^{-2}$ акцепторные состояния практически не влияют на электронную плотность. В то же время, для значений поверхностной концентрации менее $5 \times 10^{12} \text{см}^{-2}$ происходит эффективный захват носителей заряда на акцепторных состояниях, т.е., понижение концентрации электронов. Таким образом, предполагается, что в полученных в эксперименте нанопроволоках плотность поверхностных состояний была ниже 10^{12}см^{-2} , а уровень Ферми не достиг нейтрального положения и находился в пределах 60–100 мэВ выше края зоны проводимости. В соответствии с рис. 3.8 для данных нанопроволок электронная плотность сосредоточена вблизи поверхности и имеет выраженные обогащённые носителями заряда области (для значений радиуса выше 40 нм).

Присутствие донорного легирования приводит к тому, что линейная зависимость электронной плотности от радиуса нанопроволоки преобразуется к параболическому виду (рис. 3.12а). Полученные результаты могут быть качественно интерпретированы из соображений электронейтральности. Как можно заметить, в заряд нанопроволоки вносят вклад донорные и акцепторные состояния с концентрациями N_{sd} и N_{sa} соответственно, а также ионизованные объёмные донорные состояния и свободные электроны. Таким образом, средняя одномерная электронная плотность может быть записана, как $n_{1D} \sim 2a(N_{sd} - N_{sa}) + a^2 N_d^+$. Для сравнительно малой степени легирования $5 \times 10^{17} \text{см}^{-3}$ изменению положения уровня Ферми от 100 до 160 мэВ выше края зоны проводимости соответствует увеличение электронной плотности на 25% (рис. 3.12). Для более высокой степени легирования (выше 10^{18}см^{-3}) влияние поверхностных состояний на среднюю электронную плотность ослабевает и она главным образом определяется легированием.

Кроме того, в работе производилось сравнение с решением уравнений Шрёдингера и Пуассона в предположении цилиндрической формы поперечного сечения нанопроволоки [115]. Для цилиндрических нанопроволок уравнение Шрёдингера численно решается только для радиальной компоненты ВФ, что позволяет существенно сократить вычислительные ресурсы. С одной стороны, использование правильной гексагональной формы поперечного сечения позволяет оценить ряд существенных особенностей энергетического спектра и углового распределения электронной плотности. С другой стороны, в некоторых случаях задача ограничена оценкой средней электронной плотности, для которой не требуется детальное описание распределения

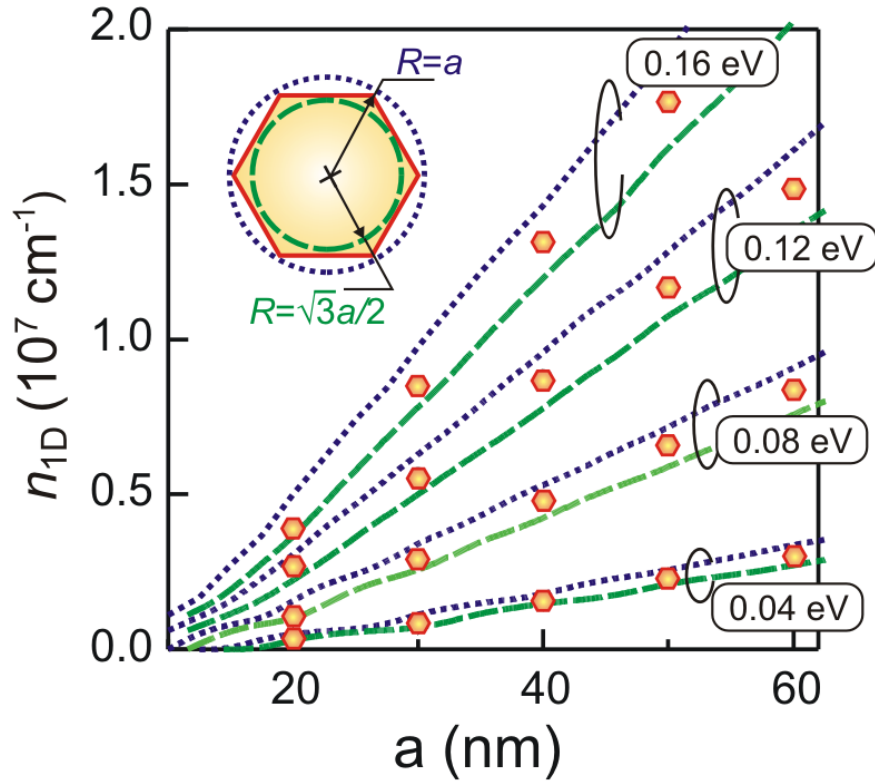


Рис. 3.13. Средняя одномерная электронная плотность InAs гексагональной (точки) и цилиндрической (линии) нанопроволоки в зависимости от радиуса нанопроволоки для температуры $T=4\text{K}$.

электронной плотности. На рис. 3.13 показано сравнение результатов расчёта с использованием гексагональной формы поперечного сечения, а также цилиндрических нанопроволок с радиусами окружностей, описанных и вписанных в гексагональное поперечное сечение. Как можно видеть, разница значений средней электронной плотности не превышает 5%. Кроме того, наилучшее соответствие между гексагональным и цилиндрическим поперечными сечениями наблюдается для радиуса цилиндра, соответствующего равенству площадей сечений.

3.6 Локализация носителей вблизи рёбер нанопроволоки для гексагональной и треугольной форм поперечного сечения

Для нанопроволок, имеющих правильную треугольную форму поперечного сечения, были проведены расчёты распределения электронной плотности. На рис. 3.14 показан вид распределения электронов в зависимости от размера треугольной нанопроволоки. Можно видеть, что

качественно особенности распределений повторяют соответствующие им зависимости для гексагональных нанопроволок. В частности, для достаточно малых размеров нанопроволоки характерно скопление электронов вблизи её оси. При этом, с увеличением диаметра структуры носители заряда перераспределяются, скапливаясь вблизи поверхности нанопроволоки. Аналогично результату для гексагональных нанопроволок, наибольшая концентрация электронов в треугольных нанопроволоках отмечается вблизи углов поперечного сечения, соответствующих рёбрам нанопроволоки.

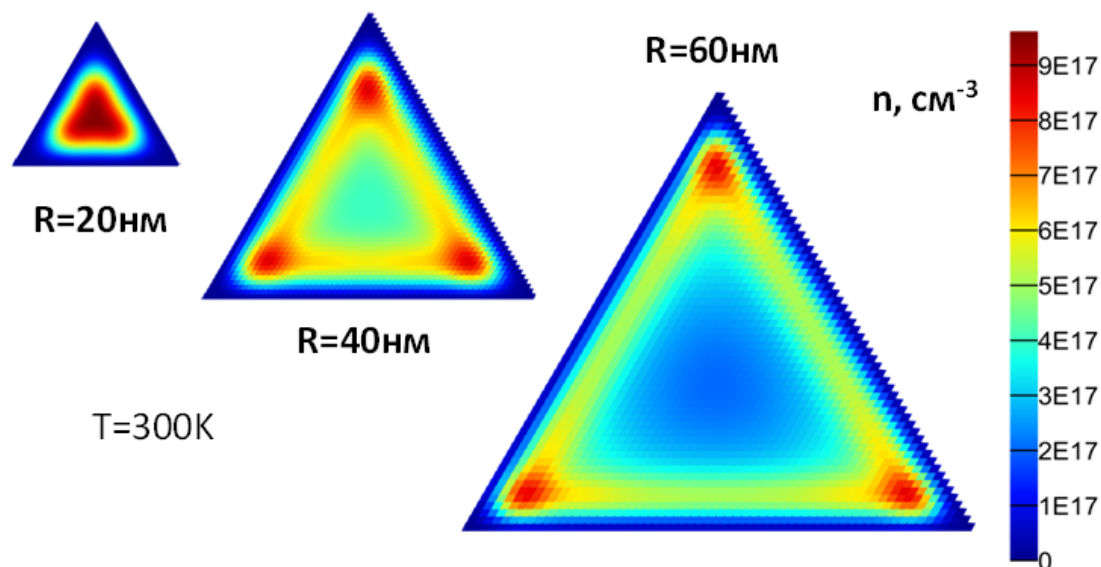


Рис. 3.14. Распределение электронной плотности в InAs нанопроволоке с правильным треугольным поперечным сечением в зависимости от размера

Была проведена количественная оценка и сравнение локализации носителей в гексагональных и треугольных нанопроволоках. В качестве меры локализации было использовано отношение максимальной величины концентрации на направлении к углу поперечного сечения и к максимальному значению концентрации по направлению к середине грани (рис. 3.9a,b). На рис. 3.15 показано сравнение меры локализации для гексагональных и треугольных нанопроволок в зависимости от их размера. Как видно из результатов, для треугольных нанопроволок характерно большее значение меры локализации. Предполагается, что это связано с большим квантовым ограничением в данных структурах благодаря более острому углу между стенками нанопроволоки.

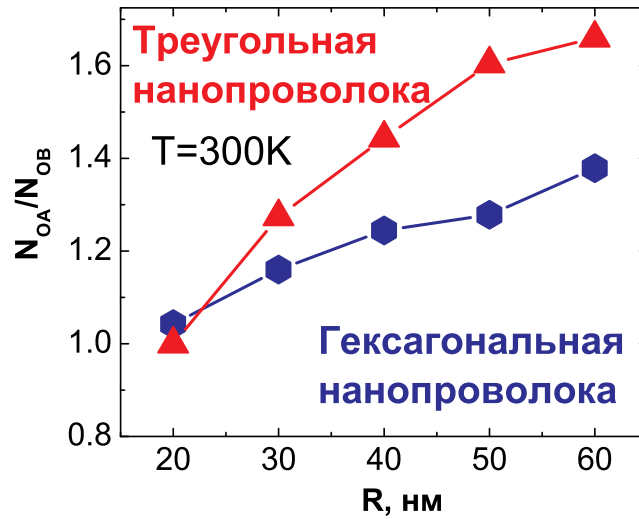


Рис. 3.15. Мера локализации носителей вблизи углов поперечного сечения для гексагональных и треугольных нанопроволок в зависимости от размера

3.7 Распределение носителей и влияние магнитного поля на энергетический спектр для гексагональных InAs нанотрубок

Помимо нанопроволок, имеющих сплошное поперечное сечение, одной из перспективных конфигураций подобных структур с двумерным квантовым ограничением являются нанотрубки, содержащие полость внутри поперечного сечения и структуры типа «ядро-оболочка» (англ. core-shell). Использование подобных структур позволяет повысить интенсивность фотолюминесценции и подвижность в эффекте поля [48]. В данном разделе для InAs нанотрубок были проведены расчёты энергетического спектра уровней размерного квантования и электронной концентрации. Геометрия поперечного сечения нанотрубки имеет большое сходство со структурой квантового кольца [116], что позволяет их использовать для наблюдения эффектов типа Ааронова-Бома и квантовой интерференции, вызванной магнитным полем. В результате для данных структур также было проведено исследование влияния продольного магнитного поля на их энергетический спектр и проводимость.

На рис.3.16 показаны результаты расчёта распределения электронной плотности в InAs нанотрубках с радиусом $R = 50$ нм и различной толщиной стенки d . Важным качественным отличием данных структур от сплошных нанопроволок является наличие внутрен-

ней поверхности раздела «вакуум-полупроводник». В результате, для достаточно большого значения ($d \approx 40$ нм) толщины стенки как внутренняя, так и внешняя поверхности нанотрубки оказываются обогащёнными электронами (рис. 3.16а., в.). Для малых значений толщины стенки ($d \approx 20$ нм) два данных максимума электронной плотности сливаются в один, и электроны сосредотачиваются примерно посередине между внутренней и внешней поверхностями нанотрубки.

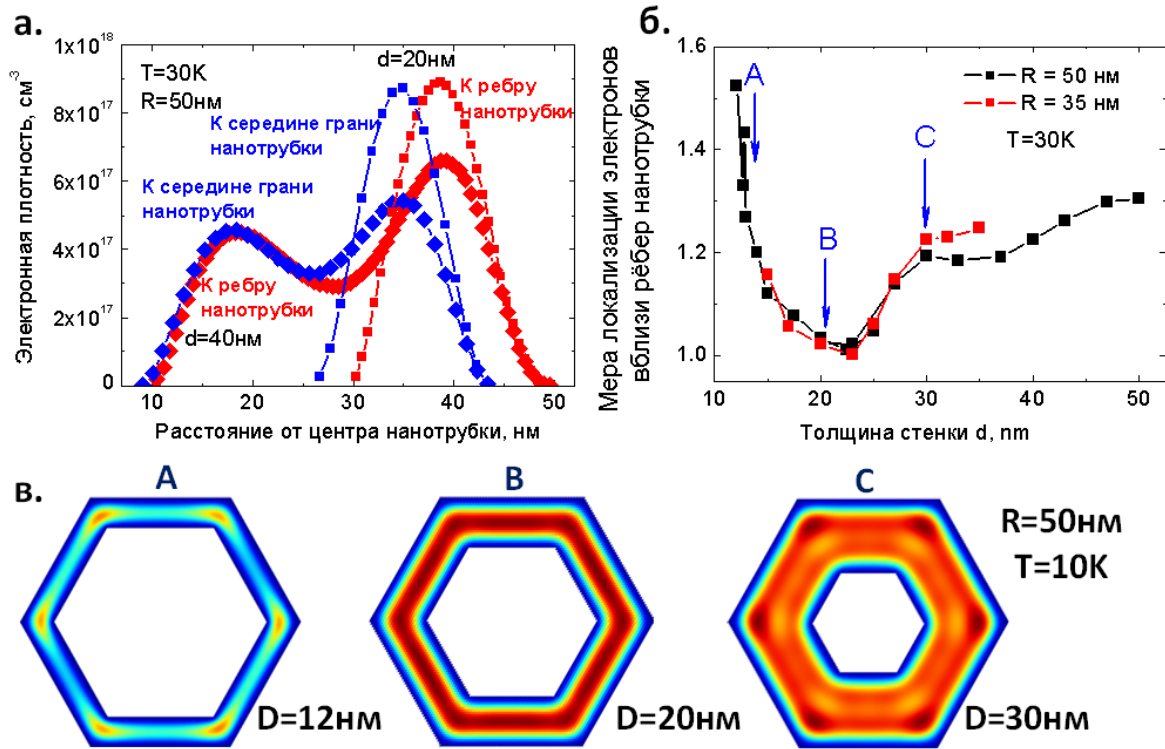


Рис. 3.16. Результаты расчёта электронной плотности в InAs нанотрубках: сечения концентрации электронов в направлении к ребру и середине грани нанотрубки для различных значений толщины стенки (а.); зависимость меры локализации электронов вблизи рёбер нанопроволоки от её радиуса и толщины стенки (б.); вид распределения электронной плотности в нанотрубках для различных значений толщины стенки

Для данных структур была проведена оценка степени локализации носителей в углах поперечного сечения по методике, аналогичной рассмотренной выше для гексагональных и треугольных нанопроволок. Полученные результаты показаны на рис. 3.16б. Как можно видеть, локализация носителей в углах имеет немонотонный вид по отношению к толщине стенки нанотрубки d , но при этом слабо зависит от радиуса нанотрубки R . Немонотонность зависимости объясняется действием двух противоположных эффектов: с ростом толщины стенки происходит постепенный переход от равномерного по углу распределения к режиму, соответствующему

сплошной нанопроволоке. При сильном уменьшении толщины стенки происходит выталкивание уровней размерного квантования выше уровня Ферми, в результате чего исчезает вырождение электронного газа и зависимость электронной концентрации и меры локализации от потенциала приобретает экспоненциальный характер, что сопровождается резким ростом меры локализации для толщины стенки $d < 15$ нм.

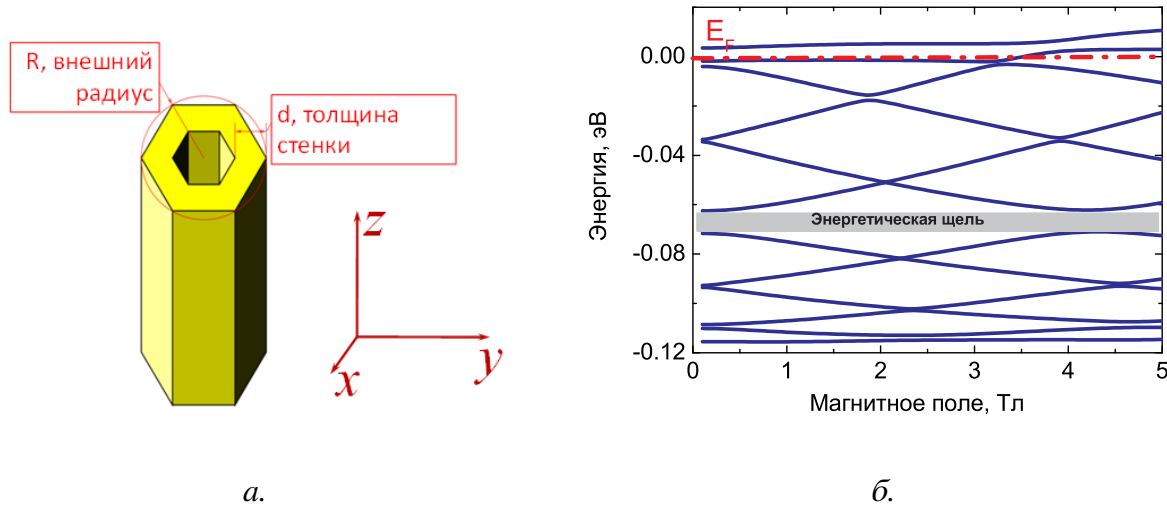


Рис. 3.17. Геометрическая схема InAs нанотрубки с приложенным магнитным полем (а.); положение уровней размерного квантования нанотрубки в зависимости от величины магнитного поля

Далее приведены результаты моделирования спектра нанопроволок и нанотрубок в зависимости от магнитного поля, приложенного вдоль оси структуры (рис. 3.17а). Для расчётов используется оператор кинетической энергии (3.20). Наблюдаются осцилляции уровней размерного квантования с увеличением величины поля. При этом энергетический спектр нанотрубок, полученный численно качественно совпадает с аналитическим спектром идеального кольца в магнитном поле [116, 117]:

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2mR^2} (l + \phi/\phi_0)^2, \quad (3.31)$$

где l — орбитальное квантовое число ($l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$), ϕ — магнитный поток, ϕ_0 — квант магнитного потока.

Как можно видеть, энергетический спектр в нанопроволоках и нанотрубках с поперечным сечением, образуемым правильным многоугольником содержит энергетические щели, вызванные угловой (азимутальной) периодичностью потенциала стенки нанопроволоки. При этом

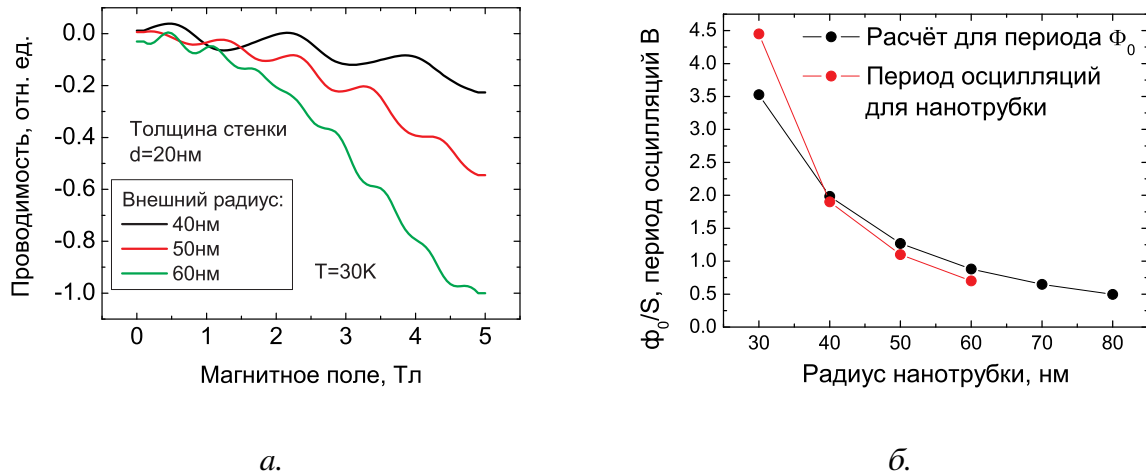


Рис. 3.18. Проводимость в зависимости от приложенного магнитного поля для гексагональных нанопроволок и нанотрубок (а.) и сравнение размерной зависимости периода осцилляций проводимости с идеальной для периода, равного одному кванту магнитного потока (б.).

уровни размерного квантования образуют энергетические зоны с количеством уровней, равным порядку оси симметрии и числу углов поперечного сечения. Величина щелей падает с ростом количества углов поперечного сечения. В предельном случае цилиндрической формы нанопроволок [8] спектр не имеет энергетических щелей и носит непрерывный характер.

С учётом наличия экспериментальных данных, показывающих наличие осцилляций проводимости [78], была сделана оценка проводимости структуры при помощи формулы Ландауэра [118]. Полученная оценка также носит осцилляторный характер (рис. 3.18а), причём период осцилляций определяется геометрическими размерами структуры и приблизительно равен одному кванту магнитного потока (рис. 3.18б). Таким образом, показано, что осцилляции спектра в нанопроволоках и нанотрубках являются следствием квантовой интерференции.

3.8 Распределение электронной плотности в треугольных нанопроволоках под влиянием внешнего электростатического напряжения

Известно, что одним из возможных практических применений полупроводниковых нанопроволок является их использование в качестве каналов полевых транзисторов [119]. Одной из возможных конфигураций таких структур являются нанопроволоки, выращенные при помощи

методов газофазной эпитаксии на кремниевой подложке [77], имеющие форму поперечного сечения, близкую к треугольной. В данном разделе была сделана оценка возможности управления распределением электронов и их средней концентрацией. Для расчётов использовалась структура, представляющая собой InAs нанопроволоку с поперечным сечением в виде прямоугольного треугольника, лежащую стороной гипотенузы на слое кремния. К сторонам катетов прикладывается управляющее напряжение. Схема структуры, граничных условий, а также изображение полученной экспериментально в работе [77] нанопроволоки приведены на рис. 3.19.

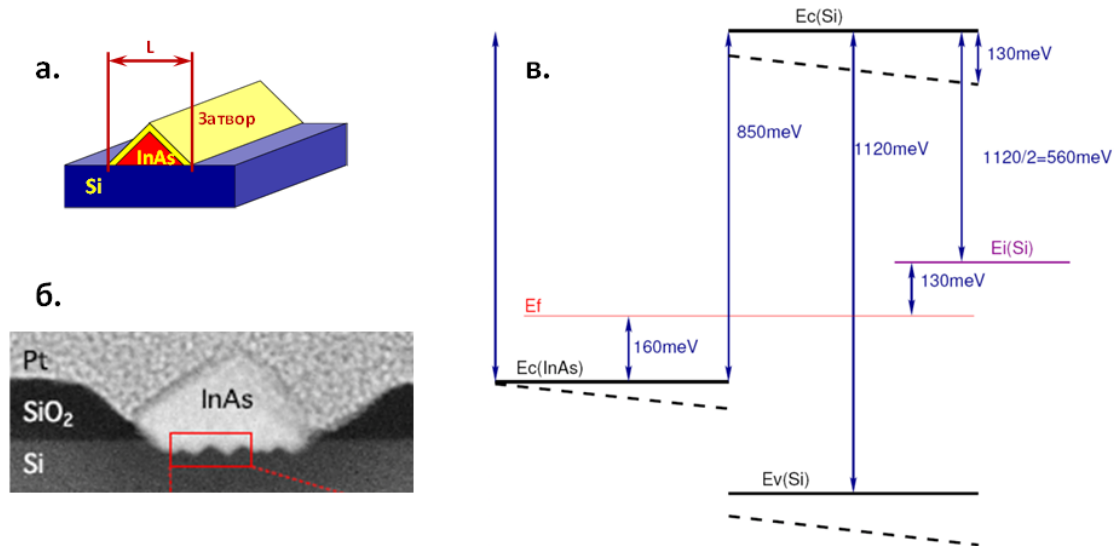


Рис. 3.19. Схема исследуемой структуры с управляемой напряжением треугольной нанопроволокой (а.); изображение полученной в эксперименте [77] нанопроволоки (б.); схема граничных условий Дирихле для уравнения Пуассона (в.)

На рис. 3.20 показаны результаты расчёта распределения электронной плотности в данных структурах в зависимости от размера. Как можно видеть, качественный вид распределения электронов повторяет вид, характерный для нанопроволок с правильной формой (гексагональной и треугольной) поперечного сечения. При достаточно малом значении длины основания (L 40 нм) электронная плотность сосредотачивается вблизи центра нанопроволоки. С увеличением размера L носители заряда концентрируются вблизи поверхности нанопроволоки.

При приложении положительного управляющего напряжения происходит обогащение носителями верхних граней нанопроволоки (рис. 3.21, $V_g = 0,2$ В). Приложение отрицательного напряжения сначала приводит к сосредоточению носителей вблизи нижней грани нанопроволоки (рис. 3.21, $V_g = -0,1$ В), а при дальнейшем росте обратного напряжения происходит сильное обеднение нанопроволоки с пиком концентрации носителей вблизи середины её

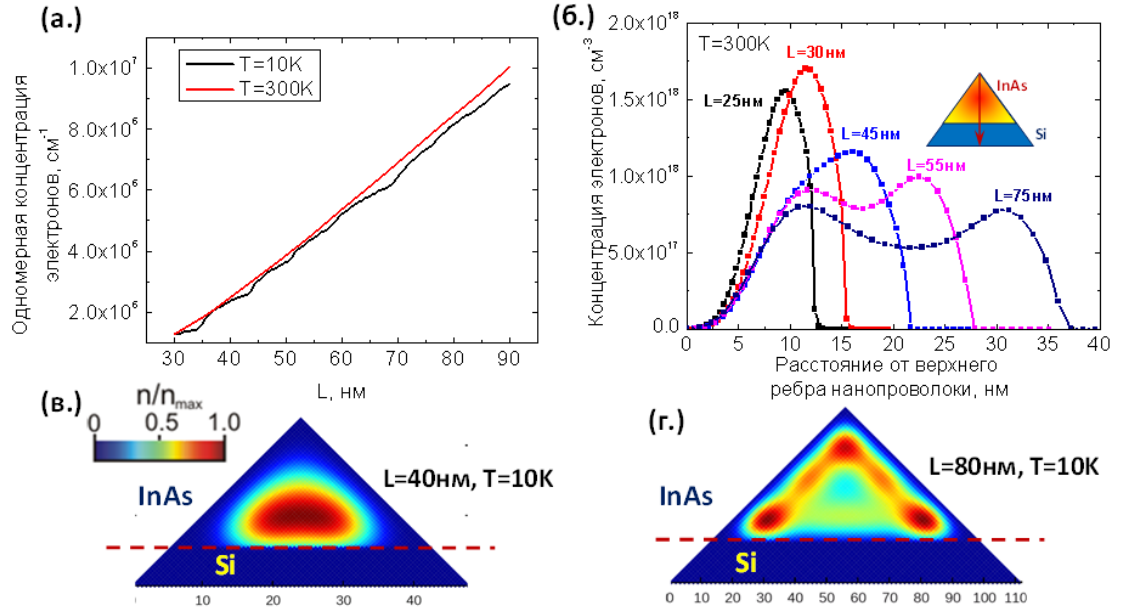


Рис. 3.20. Зависимости характеристик электронной плотности от размера для треугольной InAs нанопроволоки на Si подложке: одномерная концентрация электронов в зависимости от размера L нанопроволоки; одномерные сечения электронной плотности в нанопроволоках для различных размеров (б.); распределения электронной плотности для узких ($L = 40$ нм) (в.) и широких ($L = 80$ нм) (г.) нанопроволок.

нижней грани (рис. 3.21, $V_g = -0,25$ В).

Как можно видеть (рис. 3.21а), зависимость средней концентрации от затворного напряжения имеет вид, характерный для затворной характеристики транзисторной структуры. Для рассматриваемой структуры пороговое напряжение $V_t \approx -0,125$ В, ниже которого средняя концентрация убывает экспоненциально. Таким образом, можно сделать вывод о принципиальной возможности применения данных структур в качестве каналов полевых транзисторов.

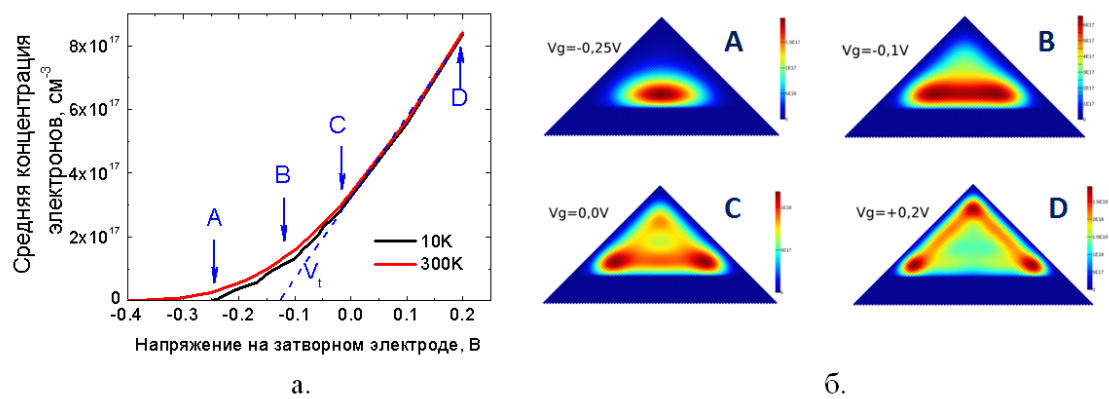


Рис. 3.21. Электронная плотность в треугольной InAs нанопроволоке ($L=55\text{nm}$) на Si подложке под влиянием затворного напряжения: зависимость средней концентрации от затворного напряжения (а.) и вид распределения электронной плотности для различных значений затворного напряжения (б.)

3.9 Результаты и выводы по главе 3

1. В InAs гексагональных нанопроволоках и нанотрубках при помощи согласованного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона проведено качественное и количественное описание неравномерного распределения электронной плотности. Гексагональные нанопроволоки демонстрируют неоднородное распределение электронов с обогащением в углах поперечного сечения структуры.
2. Электронная плотность в углах нанопроволок в значительной степени определяется размером исследуемых структур.
3. Меняя затворное напряжение, приложенное к стенке нанопроволоки, можно эффективно управлять пространственным распределением носителей как для гексагонального, так и для треугольного поперечного сечения.
4. Проведено моделирование осцилляций энергетического спектра и проводимости в нанотрубках InAs, возникающих вследствие эффекта типа Ааронова-Бома (квантовой интерференции). Показано, что величина щели энергетического спектра, определяется степенью вращательной симметрии структуры.

Глава 4

Расчёт спиновых характеристик гетероструктур $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs с одномерным квантовым ограничением

4.1 Введение

Благодаря ярко выраженным спин-зависимым явлениям квантово-размерные структуры всё чаще используются при проектировании приборов спинтроники. Спин-орбитальное взаимодействие (СОВ) приводит к перестройке энергетического спектра низкоразмерных систем, а также является основой множества физических явлений, таких как спин-гальванический эффект [34], спиновый эффект Холла [35], спиновая релаксация [36]. Все перечисленные эффекты являются ключевыми для конструирования приборов, основанных на спин-зависимых эффектах. Присутствие в гетероструктурах тяжёлых элементов и асимметрии потенциала может приводить к ещё более заметным спиновым явлениям.

В то же время известно, что процессы спиновой релаксации носителей приводят к разрушению спинового состояния в системе, вследствие этого создают трудности при выполнении операций и передачи информации в приборах спинтроники. С этой точки зрения наиболее перспективными являются полупроводниковые системы, где скорости спиновой релаксации малы. Для корректной интерпретации целого ряда спин-зависимых явлений необходимо знать электронный спектр квантовых структур, уметь теоретически предсказывать поведение спиновых характеристик при изменении технологических параметров системы.

В двумерных кристаллических системах основной вклад в СОВ вносят взаимодействие Дрессельхауза, обусловленное асимметрией отсутствием центра инверсии в кристаллической

структуре опорного кристалла, и взаимодействие Рашба, вызванное асимметрией гетероструктуры. Известно, что значением последнего можно эффективно управлять, прикладывая внешнее электрическое поле [120]. Данная модификация параметров СОВ внешним полем существенным образом влияет на кинетические и динамические спиновые характеристики двумерного электронного газа. Известно, что в КЯ на основе полупроводниковых соединений $A^{III}B^V$ и $A^{II}B^{VI}$ с направлением роста [001], варьируя параметры структуры и внешнего воздействия, может быть реализовано равенство параметров СОВ Рашба и Дрессельхауза. В данном режиме эффективное спин-орбитальное поле будет являться однонаправленным и приводить к спиновой прецессии, коррелирующей с поступательным движением носителей — устойчивым спиновым хеликсам [121]. Спиновые хеликсы также могут быть реализованы в широком классе двумерных полупроводниковых систем. Режим спинового хеликса в КЯ заметно снижает скорость спиновой релаксации электронов проводимости, что расширяет возможности проектирования спиновых приборов на основе данных структур [122].

Необходимо отметить, однако, что экспериментальное определение параметров СОВ в каждом конкретном случае остаётся сложной задачей ввиду необходимости применения специальных методов исследования. В связи с этим для прогнозирования спиновых свойств необходим предварительный дизайн квантово-размерных гетероструктур с учётом СОВ. Модельные расчёты позволяют проследить корреляцию между технологическими параметрами роста и величиной СОВ в структурах с произвольным составом, оценить расщепление энергетических подзон, а также исследовать возможность управления соотношением параметров СОВ в различных гетеросистемах. Одной из задач, решаемых в рамках данной главы, являлось выявление условий формирования электронных спиновых хеликсов в КЯ. К ним относятся геометрические параметры структуры, химический состав, величина приложенного внешнего поля.

Ранее в работах Пфеффера и Завадского [11, 12] и Пфеффера [13, 14] было рассчитано спиновое расщепление электронных состояний в КЯ на основе прямозонных материалов $A^{III}B^V$. В работах [11, 13, 14] приближение функции огибающей функции с 14-зонной моделью Кейна использовалось для получения аналитических выражений для спинового расщепления Рашба и Дрессельхауза, тогда как в [12] параметры СОВ рассчитывались с помощью «традиционной» 8-зонной модели Кейна. Все расчёты проводились с учётом разрыва параметров зон и внешнего электрического поля, порождающего асимметрию КЯ. В [123] использовалась такая же аппроксимация многозонной огибающей, основанная как на 8×8 , так и 14×14 гамильтонианах. Одним из основных выводов этой главы является то, что применение 14-зонной модели Кейна для расчётов спинового расщепления даёт незначительные улучшения по сравнению с результатами, полученными с использованием «традиционной» модели, в то время как число параметров,

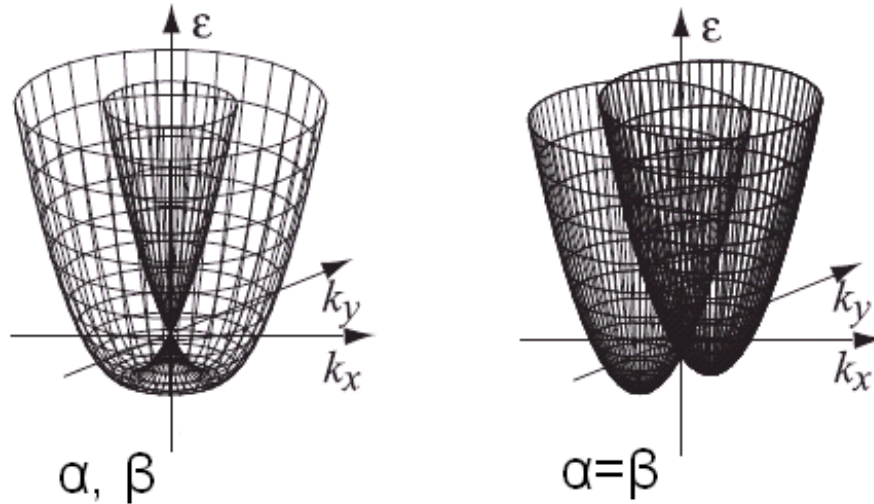


Рис. 4.1. Спиновое расщепление, образованное только СОВ Рашба или Дрессельхауза (а.) и наблюдаемое при равенстве СОВ Рашба и Дрессельхауза (б.) [89].

уравнений и сложность расчётов достаточно высока. В частности, в КЯ на основе твёрдого раствора $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ширина запрещённой зоны оказывается заметно меньше, чем энергетический зазор между первой и второй зонами проводимости, в связи с чем расчёт параметров СОВ возможен в рамках 8-зонной модели Кейна [108, 124], точно учитывающей $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -взаимодействие зоны проводимости и валентной зоны, а влияние всех остальных зон — по теории возмущений. Таким образом, использование 8-зонной модели Кейна, принятой для расчётов спин-зависимых свойств, является более предпочтительным.

В то время как вышеупомянутые работы в основном делают акцент на вычислении параметров СОВ для самой низкой электронной подзоны, некоторые экспериментальные данные показывают, что в зоне проводимости КЯ носителями может быть населена более чем одна подзона [15–18]. Для таких систем важно знать параметры СОВ для нескольких подзон. Теоретическое описание СОВ в КЯ с двумя подзонами было впервые предложено в [19] и затем разработано в [20, 21]. В этих работах авторы, использующие 8-зонную модель Кейна, получили эффективный 2-зонный гамильтониан в базисе огибающих ВФ, содержащий как внутри-, так и межподзонные линейные члены СОВ. Заметим, что для низких значений энергии и длины волнового вектора поправка к спектрам от обычного внутризонного СОВ линейна по волновому вектору, а вклад в дисперсионные кривые из межподзонного СОВ начинается со второго порядка [20].

Во всех этих работах [11–14, 19–21] использовалась процедура усреднения добавок СОВ

(Рашба, либо Рашба и Дрессельхауза) по состояниям, полученным в приближении огибающей, которая была впервые предложена Дьяконовым и Качоровским в 1986 году [22]. Основным преимуществом их подхода является полуаналитический способ получения выражений для параметров СОВ: необходимо вычислить огибающую функцию, а затем определить существенные матричные элементы. Однако далее будет показано, что это лишь первое приближение к параметрам СОВ, поскольку часть информации о спектрах и ВФ теряется при действии процедуры усреднения.

В этой главе путём непосредственного численного моделирования была разработана и применена методика, позволяющая оценить параметр Дрессельхауза для симметричных квантово-размерных структур и количественно определить вклад взаимодействия Рашба в СОВ в присутствии асимметрии структуры, вызванной электрическим полем, приложенным в направлении её роста. Методика численного моделирования основана на 8-зонной модели Кейна и приближении эффективной массы. К полученным в рамках указанных приближений уравнениям применяется метод конечных разностей. Решая данную задачу с помощью схемы дискретизации в координатном пространстве, рассчитываются дисперсионные зависимости энергетического спектра КЯ. Из анализа полученных дисперсионных зависимостей извлекаются параметры СОВ.

Изучаются зависимости параметров спинового расщепления от электрического поля для различных подзон размерного квантования и значений ширины КЯ для гетероструктур на основе материалов $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs и $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ /GaSb. Кроме того, одной из задач является выявление факторов, влияющих на соотношение между параметрами Рашба и Дрессельхауза, определяющих степень и характер спин-зависимых явлений в исследуемых структурах.

4.2 Постановка задачи

В данной главе будут решены следующие задачи:

1. Разработка алгоритма для численного моделирования дисперсионных кривых энергетического спектра размерного квантования в гетероструктурах с одномерным квантованием на основе 8-зонной модели Кейна.
 - Проверка и верификация созданных алгоритмов при помощи моделирования тестовых структур, для которых существуют известные решения.
 - Выявление и модификация метода для исключения нефизичных результатов, связанных с артефактами численного расчёта.

2. Разработка методики извлечения из результатов численного моделирования энергетического спектра параметров спин-орбитального взаимодействия.
3. Применение разработанных методик и алгоритмов для исследования одномерных гетероструктур, содержащих квантовую яму на основе материалов $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs и $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ /GaSb:
 - Исследование СОВ Дрессельхауза в одиночной симметричной квантовой яме в зависимости от материалов системы «яма-барьер», содержания индия и ширины КЯ.
 - Исследование отношения вкладов Рашба и Дрессельхауза в СОВ для структур с одиночными КЯ InGaAs/GaAs в однородном электрическом поле в направлении квантования. Определение условий возникновения устойчивых спиновых хеликсов.
 - Исследование возможности управления спин-орбитальным взаимодействием Рашба в гетероструктурах, содержащих асимметричный ступенчатый профиль состава.

4.3 Метод расчёта в рамках 8-зонной модели Кейна

В работе теоретически исследуются электронные состояния в КЯ на основе $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs и $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ /GaSb при учёте СОВ. С точностью до членов 3-его порядка по волновому вектору электронный гамильтониан вблизи дна зоны проводимости объёмного кристалла со структурой цинковой обманки имеет вид [93],:

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{\sigma}_0 + \gamma_D (\kappa_x \hat{\sigma}_x + \kappa_y \hat{\sigma}_y + \kappa_z \hat{\sigma}_z), \quad (4.1)$$

где $\kappa_x = k_x(k_y^2 - k_z^2)$, $\kappa_y = k_y(k_z^2 - k_x^2)$ и $\kappa_z = k_z(k_x^2 - k_y^2)$ — компоненты вектора, характеризующего эффективное магнитное поле, обусловленное СОВ, k_x , k_y и k_z — компоненты волнового вектора электрона, $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$ и $\hat{\sigma}_0$ — матрицы Паули и единичная матрица соответственно, γ_D — параметр Дрессельхауза в объёмном материале, а оси декартовых координат x , y и z отвечают кристаллографическим направлениям типа $[0\ 0\ 1]$. Второе слагаемое в выражении (4.1) называют СОВ Дрессельхауза в объёмном материале. Оно обусловлено отсутствием центра инверсии в элементарной ячейке кристалла.

В КЯ СОВ претерпевает изменение вследствие размерного квантования для носителей в направлении роста ямы. Считая, что движение квантуется в направлении $\vec{a}$, электронные состояния в КЯ, отвечающие малым двумерным волновым векторам $\vec{k}$, будут описываться двухкомпонентной (с учётом спина) огибающей функцией $\psi_{n,s,\vec{k}}(\vec{a} \cdot \vec{r})$, где n — номер подзоны размерного

квантования, а индекс s характеризует спиновое состояние. Далее будем полагать, что КЯ выращены в кристаллографическом направлении $[0\ 0\ 1]$, которому в гамильтониане (4.1) отвечает ось z .

Для расчёта параметров СОВ в нескольких подзонах размерного квантования наиболее корректным является применение многозонных моделей, точно учитывающих взаимодействие зон.

В общем виде гамильтониан в рамках 8-зонной модели Кейна записывается в следующем виде [95]:

$$H(k_x, k_y, k_z) = \begin{pmatrix} H_4 & 0 \\ 0 & H_4 \end{pmatrix} + H_{SO} \quad (4.2)$$

где блок 4×4 записывается как

$$H_{4 \times 4} = \hat{I} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \begin{pmatrix} E_{CB,\vec{0}} + Ak^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{VB,\vec{0}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{VB,\vec{0}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{VB,\vec{0}} \end{pmatrix} + \quad (4.3)$$

$$+ \begin{pmatrix} 0 & i\frac{\hbar k_x P}{m_0} + Bk_y k_z & i\frac{\hbar k_y P}{m_0} + Bk_x k_z & i\frac{\hbar k_z P}{m_0} + Bk_x k_y \\ -i\frac{\hbar k_x P}{m_0} + Bk_y k_z & Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) & Nk_x k_y & Nk_x k_z \\ -i\frac{\hbar k_y P}{m_0} + Bk_x k_z & Nk_x k_y & Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2) & Nk_y k_z \\ -i\frac{\hbar k_z P}{m_0} + Bk_x k_y & Nk_x k_z & Nk_y k_z & Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) \end{pmatrix},$$

а оператор спин-орбитального взаимодействия

$$H_{SO} = \frac{\Delta_{SO}}{3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & i & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

Если в гетероструктуре присутствует квантование в каком-либо пространственном направлении, проводится замена проекций волнового вектора на соответствующие дифференциальные операторы. В частности, для квантования вдоль оси z $||[001]$, $k_z \rightarrow \hat{k}_z = -i\frac{\partial}{\partial z}$.

Используя процедуру симметризации [125], запишем преобразования элементов гамильтониана:

$$\begin{aligned}
\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} &\rightarrow \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(k_x^2 + k_y^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right), \\
Ak^2 &\rightarrow A(k_x^2 + k_y^2) - \frac{\partial}{\partial z} \left(A(z) \frac{\partial}{\partial z} \right), \\
Bk_z &\rightarrow -\frac{i}{2} \left(\frac{\partial}{\partial z} B(z) + B(z) \frac{\partial}{\partial z} \right).
\end{aligned} \tag{4.5}$$

где A, B — параметры гамильтониана Кейна, зависящие от координаты ввиду пространственного изменения свойств материала.

При записи Гамильтониана дифференциальные операторы действуют на i -ю компоненту огибающей ВФ $\Psi_i(z)$. Выпишем отдельно действие третьего оператора на волновую функцию:

$$-\frac{i}{2} \left(\frac{\partial}{\partial z} B(z) + B(z) \frac{\partial}{\partial z} \right) \Psi_i(z) = -i \left(B(z) \frac{\partial \Psi_i(z)}{\partial z} + \frac{1}{2} \Psi_i(z) \frac{\partial B(z)}{\partial z} \right) \tag{4.6}$$

Таким образом, Гамильтониана (4.2) приобретает вид дифференциального оператора:

$$H_{8 \times 8} \rightarrow \hat{H}_{8 \times 8}(z). \tag{4.7}$$

Тогда дисперсионное уравнение для энергетического спектра объёмного материала $H_{8 \times 8}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ преобразуется в соответствующее уравнение шрёдингеровского типа для двумерной гетероструктуры. Решением данного уравнения является восьмикомпонентная огибающая волновой функции $C_i(k_x, k_y, z)$, зависящая от геометрической координаты z и компонент волнового вектора в направлениях свободного движения k_x и k_y :

$$\sum_j \hat{H}_{i,j}(k_x, k_y, -i \frac{\partial}{\partial z}) C_j(k_x, k_y, z) = E(k_x, k_y) C_i(k_x, k_y, z) \tag{4.8}$$

4.4 Методика численного моделирования спектра в рамках 8-зонной модели Кейна

4.4.1 Дискретизация гамильтониана Кейна при помощи метода конечных разностей

Поскольку при произвольном профиле потенциальной энергии уравнение шрёдингеровского типа (4.8) для гетероструктур не может быть решено аналитически, в работе проводится его численное решение. Для этой цели производится дискретизация данного уравнения в рамках метода конечных разностей на равномерной координатной сетке.

В общем случае переход к уравнениям в конечных разностях может быть представлен как замена некоторой рассматриваемой функции $f(z)$ на вектор, показывающий значения функции в точках дискретной сетки z_i :

$$\begin{aligned} f(z) &\rightarrow f_i = f(z = z_i), \\ z_i &= z_0 + i\Delta z. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Тогда действие дифференциальных операторов в конечных разностях сводится к умножению вектора-столбца функции координаты на соответствующие матрицы. Запишем вид матриц для дифференциальных операторов (4.5) и (4.6), используемых в модели Кейна:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi(z)}{\partial z} &\rightarrow \frac{1}{2\Delta z} \sum_j (\delta_{i,j+1} - \delta_{i,j-1}) \Psi_j, \\ \frac{\partial B(z)}{\partial z} &\rightarrow \frac{B_{i+1} - B_{i-1}}{\Delta z}, \\ \frac{\partial^2 \Psi(z)}{\partial z^2} &\rightarrow \frac{1}{\Delta z^2} \sum_j (\delta_{i,j+1} - 2\delta_{i,j} + \delta_{i,j-1}) \Psi_j, \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(A(z) \frac{\partial \Psi(z)}{\partial z} \right) &\rightarrow \frac{1}{\Delta z^2} \sum_j \left(A_{j+\frac{1}{2}} \delta_{i,j+1} - (A_{j+\frac{1}{2}} + A_{j-\frac{1}{2}}) \delta_{i,j} + A_{j-\frac{1}{2}} \delta_{i,j-1} \right) \Psi_j. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Способ построения матриц аналогичен рассмотренному в разд. 2.3.1 для численного решения задачи в рамках приближения эффективной массы. Для определения параметров Кейна в пространстве между узлами сетки в данной работе используется линейная интерполяция $A_{n\pm\frac{1}{2}} \approx \frac{1}{2}(A_n + A_{n\pm 1})$

Как видно, при переходе к конечным разностям в координатно-зависящем шрёдингеровском уравнении (4.8) огибающая волновой функции $C_i(x, k_y, k_z)$ приобретает дополнительный индекс координаты:

$$C_i(k_x, k_y, k_z) \rightarrow C_{k,i}(k_x, k_y), \quad (4.11)$$

а уравнение для расчёта энергетического спектра (4.8) приобретает вид

$$\sum_{n,j} H_{8 \times 8l,n,i,j}(k_x, k_y) C_{n,j}(k_x, k_y) = E(k_x, k_y) C_{l,i}(k_x, k_y) \quad (4.12)$$

Очевидно, что для связной одномерной области, на которой определена дискретная сетка при построении дифференциальных операторов в конечных разностях, возможен следующий способ переобозначения пар индексов в уравнении (4.12):

$$\begin{aligned}(li) &\rightarrow Nl + i, \\ (nj) &\rightarrow Nn + j\end{aligned}\tag{4.13}$$

При подстановке (4.13) в (4.12) можно видеть, что задача о нахождении решения энергетического спектра гетероструктуры в рамках модели Кейна сводится к нахождению собственных векторов $C_\alpha(k_x, k_y)$ и значений $E(k_x, k_y)$ матрицы $H_{\alpha,\beta}(k_x, k_y)$, зависящей от непрерывно меняющихся волновых чисел k_x и k_y :

$$\sum_{\beta} H_{\alpha,\beta}(k_x, k_y) C_{\beta}(k_x, k_y) = E(k_x, k_y) C_{\alpha}(k_x, k_y),\tag{4.14}$$

4.4.2 Ограничения схемы дискретизации: нефизичные быстро-осциллирующие состояния

Одной из проблем нахождения энергетического спектра гетероструктур, возникающих при решении волновых уравнений методами, использующими дискретизацию координатного пространства, является появление нефизичных быстро-осциллирующих состояний. В рамках $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -приближения и рассматриваемой модели Кейна данная проблема приобретает большее значение, чем для задачи в приближении эффективной массы. В частности, в приближении эффективной массы для устранения «паразитных» состояний достаточно подобрать достаточно малый шаг сетки, что повышает положение «паразитной долины». В то же время, в многозонных моделях смещение положения «паразитной долины» с шагом сетки может быть как положительным, так и отрицательным. При отрицательном смещении (см. рис. 4.2) «паразитной долины» при достаточно малом шаге сетки её положение оказывается ниже дна зоны проводимости, почти полностью перекрывая запрещённую зону. Это приводит к исчезновению полосы запрещённой зоны из полученного в результате расчёта энергетического спектра (рис. 4.2а.). Кроме того, при сильном уменьшении шага сетки в модельном спектре происходит сильное искажение краёв зон, что приводит к практически полному исчезновению искомым физических состояний из результатов расчёта.

Далее проведён анализ положения «паразитной долины» для рассматриваемой в работе модели Кейна в отсутствии СОВ для направления квантования (100). В этом случае гамильтониан объёмного материала определяется выражением (4.2).

Рассмотрим квантование вдоль оси z для нулевого значения квазиволнового вектора свободного движения $k_y = k_x = 0$, обозначив $k_z = k$. Будем рассматривать случай нулевого СОВ, т.е. $\Delta = 0$. Тогда матрица гамильтониана приобретает блочный вид:

$$\left(\begin{array}{cc|cc} E_{CB} + (\frac{\hbar^2}{2m_0} + A)k^2 & i\frac{\hbar}{m_0}Pk & 0 & 0 \\ -i\frac{\hbar}{m_0}Pk & E_{VB} + \frac{\hbar^2}{2m_0}k^2 + Lk^2 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & E_{VB} + \frac{\hbar^2}{2m_0}k^2 + Mk^2 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & E_{VB} + \frac{\hbar^2}{2m_0}k^2 + Mk^2 \end{array} \right) \quad (4.15)$$

Решения для второго и третьего блока полностью аналогичны решению задачи для приближения эффективной массы, рассмотренного в главе 2. Рассмотрим более подробно первый блок, представляющий собой матрицу 2×2 :

$$H_2 = \begin{pmatrix} E_{CB} + \tilde{A}k^2 & i\tilde{P}k \\ -i\tilde{P}k & E_{VB} + \tilde{L}k^2 \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

где введены обозначения: $\tilde{A} = \frac{\hbar^2}{2m_0} + A$, $\tilde{P} = \frac{\hbar}{m_0}P$, $\tilde{L} = \frac{\hbar^2}{2m_0} + L$.

Получим собственные значения для данного гамильтониана 2×2 :

$$\varepsilon_2 = E_i + \frac{1}{2}(\tilde{A} + \tilde{L})k^2 \pm \frac{1}{2}\sqrt{(E_g + (\tilde{A} - \tilde{L})k^2)^2 + 4\tilde{P}^2k^2}, \quad (4.17)$$

где $E_g = E_{CB} - E_{VB}$, $E_i = \frac{1}{2}(E_{CB} - E_{VB})$.

Далее преобразуем рассматриваемый гамильтониан к виду дифференциального оператора, как показано ранее:

$$\hat{H}_2 = \begin{pmatrix} E_{CB} - \tilde{A}\frac{\partial^2}{\partial z^2} & \tilde{P}\frac{\partial}{\partial z} \\ -\tilde{P}\frac{\partial}{\partial z} & E_{VB} - \tilde{L}\frac{\partial^2}{\partial z^2} \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

Рассмотрим бесконечную дискретную равномерную сетку с шагом a . При переходе к конечным разностям аналогично разд. 2.3.4 получим матрицу-оператор следующего вида:

$$H_{i,j} = \left(\begin{array}{ccc|cc|cc|c} \ddots & & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ \cdots & E_{CB} + \frac{2\tilde{A}}{a^2} & 0 & -\frac{\tilde{A}}{a^2} & \frac{\tilde{P}}{2a} & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & 0 & E_{VB} + \frac{2\tilde{L}}{a^2} & -\frac{\tilde{P}}{2a} & -\frac{\tilde{L}}{a^2} & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & -\frac{\tilde{A}}{a^2} & -\frac{\tilde{P}}{2a} & E_{CB} + \frac{2\tilde{A}}{a^2} & 0 & -\frac{\tilde{A}}{a^2} & \frac{\tilde{P}}{2a} & \cdots \\ \cdots & \frac{\tilde{P}}{2a} & -\frac{\tilde{L}}{a^2} & 0 & E_{VB} + \frac{2\tilde{L}}{a^2} & -\frac{\tilde{P}}{2a} & -\frac{\tilde{L}}{a^2} & \cdots \\ \cdots & 0 & 0 & -\frac{\tilde{A}}{a^2} & -\frac{\tilde{P}}{2a} & E_{CB} + \frac{2\tilde{A}}{a^2} & 0 & \cdots \\ \cdots & 0 & 0 & \frac{\tilde{P}}{2a} & -\frac{\tilde{L}}{a^2} & 0 & E_{VB} + \frac{2\tilde{L}}{a^2} & \cdots \\ \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\tilde{A}}{a^2} & -\frac{\tilde{P}}{2a} & \cdots \\ \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\tilde{P}}{2a} & -\frac{\tilde{L}}{a^2} & \cdots \\ \ddots & & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{array} \right). \quad (4.19)$$

Используя теорему Блоха, запишем уравнение для закона дисперсии бесконечной сетки:

$$(\hat{\varepsilon} + e^{ika}\hat{t} + e^{-ika}\hat{t}^\dagger)|\Psi\rangle = E(k_z)|\Psi\rangle, \quad (4.20)$$

где $\hat{\varepsilon}$ и $\hat{t}$ — блоки конечно-разностной матрицы $H_{i,j}$:

$$\hat{\varepsilon} = \begin{pmatrix} E_{CB} + \frac{2\tilde{A}}{a^2} & 0 \\ 0 & E_{VB} + \frac{2\tilde{L}}{a^2} \end{pmatrix}, \hat{t} = \begin{pmatrix} -\frac{\tilde{A}}{a^2} & \frac{\tilde{P}}{2a} \\ -\frac{\tilde{P}}{2a} & -\frac{\tilde{L}}{a^2} \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

В левой части выражения (4.20) разложим множитель e^{iak} в ряд Тейлора в окрестности $k_z = 0$ т.е. вблизи минимума основной долины, до второго порядка:

$$e^{ika} \approx 1 + ika - \frac{k^2 a^2}{2}, \quad (4.22)$$

в результате получим приближённую матрицу конечно-разностного гамильтониана для основных состояний в данной окрестности:

$$\lim_{k \rightarrow 0} H_{FDM} = \begin{pmatrix} E_{CB} + \tilde{A}k^2 & i\tilde{P}k \\ -i\tilde{P}k & E_{VB} + \tilde{L}k^2 \end{pmatrix}. \quad (4.23)$$

Матрица (4.23) совпадает с исходной матрицей гамильтониана объёмного материала 2×2 , т.е. решения для являются физическими состояниями системы.

Аналогично рассмотрим предел второй границы зоны Бриллюэна конечно-разностной задачи, т.е. $k_z \approx \frac{\pi}{a}$. Введя переобозначение $k' = k - \frac{\pi}{a}$, запишем разложение в ряд Тейлора функции e^{ika} вблизи вышеуказанной точки

$$e^{ika} \approx -1 - ik'a + \frac{k'^2 a^2}{2}, \quad (4.24)$$

тогда матрица гамильтониана в окрестности «паразитной» долины выглядит следующим образом:

$$\lim_{k \rightarrow \frac{\pi}{a}} H_{FDM} = \begin{pmatrix} E_{CB} + \frac{4\tilde{A}}{a^2} - \tilde{A}k'^2 & -i\tilde{P}k' \\ i\tilde{P}k' & E_{VB} + \frac{4\tilde{L}}{a^2} - \tilde{L}k'^2 \end{pmatrix}. \quad (4.25)$$

Как видно, гамильтониан (4.25) аналогичен выражению (4.23), однако при этом описывает нефизичные состояния. Устремляя k' к нулю, из выражения (4.25) определим положение «паразитных» долин для зоны проводимости и валентной зоны, равные $E_{CB} + 4\tilde{A}/a^2$ и $E_{VB} + 4\tilde{L}/a^2$ соответственно. Рассмотрим паразитную долину для зоны проводимости. В зависимости от знака параметра $\tilde{A}$, с уменьшением значения шага сетки её положение может как возрастать (при

$\tilde{A} > 0$), так и убывать (при $\tilde{A} < 0$). При этом для различных полупроводниковых материалов данный параметр может иметь как положительное, так и отрицательное значение [95, 126], в отличие от параметра $\tilde{L}$ валентной зоны, который отрицателен для всех рассматриваемых полупроводников. Пусть параметр $\tilde{A} > 0$, тогда для удаления нефизичных состояний из моделируемого спектра достаточно уменьшить шаг сетки, аналогично тому, как это сделано в приближении эффективной массы [118]. В случае , при уменьшении шага сетки происходит понижение энергии «паразитной» долины, что приводит к смешиванию её состояний с физическими (рис. 4.2a). В данной работе согласно Бастарду [127], для устранения «паразитных» состояний из моделируемого участка энергетического спектра параметр $\tilde{A}$ задаётся равным $\hbar^2/2m_0$. Далее, используя известное значение эффективной массы электрона в зоне проводимости, проводится перерасчёт матричного элемента импульса [128].

$$P = \frac{\hbar E_g}{2} \left(\frac{m_0}{m_{CB}} - 1 \right). \quad (4.26)$$

При достаточно низком значении шага сетки а нефизичные состояния удаляются из области спектра (рис. 4.2). Значение эффективной массы при этом остаётся истинным.

4.5 Спиновое расщепление в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ и $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}/\text{GaSb}$ квантовых ямах

Гетероструктуры на основе полупроводников $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ широко используются для конструирования приборов спинтроники. Необходимо отметить, что для эффективной работы данных устройств, требуется большое значение спинового расщепления энергетического спектра, определяющего принципиальную возможность создания спиновой поляризации электронного газа. Для выявления корреляции между величиной спинового расщепления и реальными параметрами выращенных гетероструктур, проведены расчёты по изложенной выше методике для различных гетеропар и их составов. В частности, рассчитаны значения спинового расщепления в структурах, состоящих из одиночной КЯ $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, а также $\text{GaSb}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}/\text{GaSb}$. Проведена оценка зависимости спинового расщепления электронных подзон в зависимости от величины электрического поля и параметра спин-орбитального расщепления объёмного материала. На рис. 4.3 и 4.4 показаны результаты расчёта спинового расщепления и соответствующие дисперсионные кривые.

Анализ проводился как для симметричных КЯ, так и для КЯ с ярко выраженной асимметрией. Асимметричный вклад в потенциал моделировался посредством включения внешнего

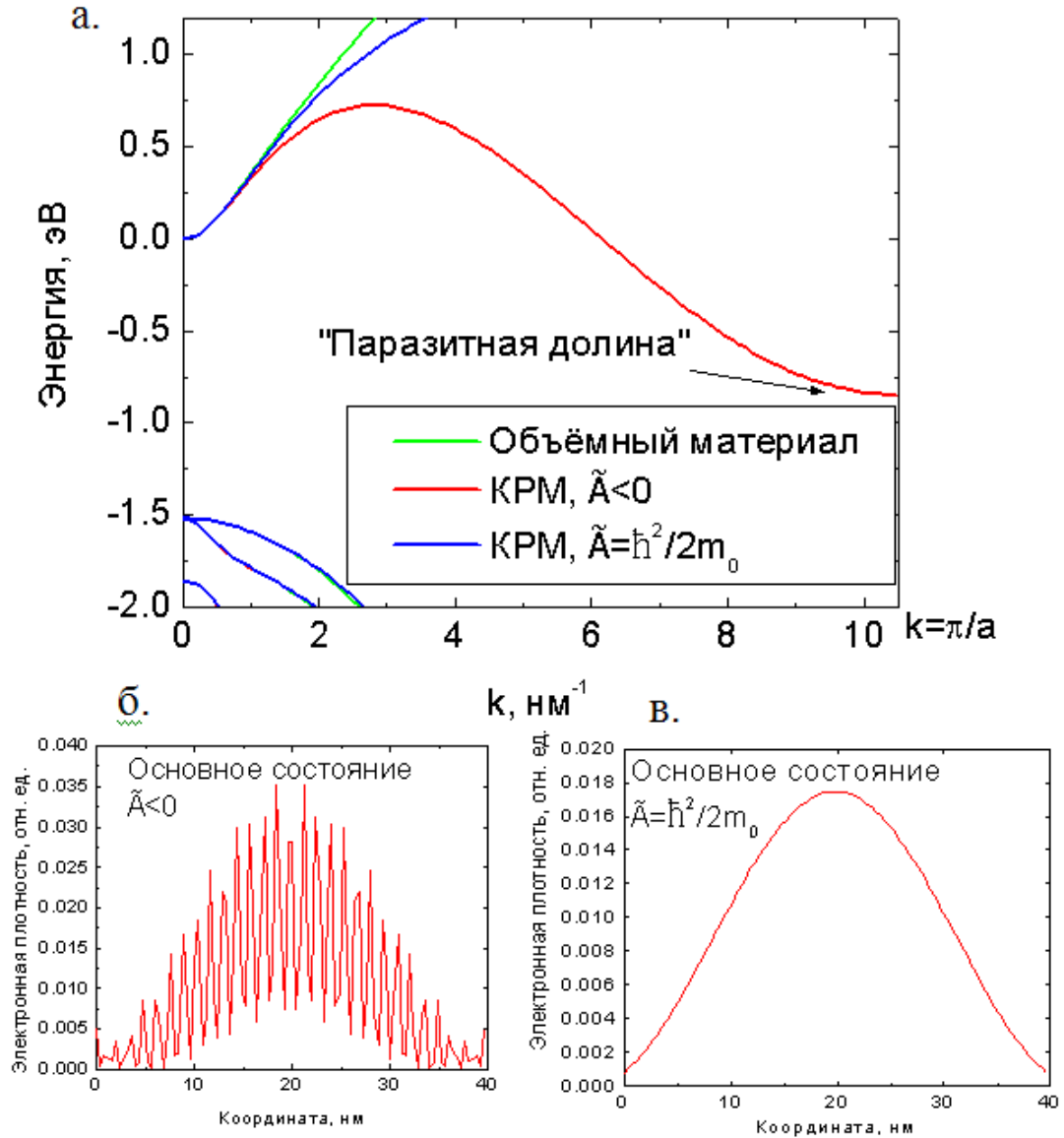


Рис. 4.2. Влияние нефизичных состояний «паразитной» долины: сравнение зонной структур объёмного материала для исходного гамильтониана Кейна и после дискретизации при помощи метода конечных разностей (КРМ) для различных значений параметра (а.), основное состояние КЯ, смешанное с «паразитным» состоянием (б.) и скорректированное основное состояние (в.)

электрического поля (порядка 1 мВ/нм) в направлении роста структуры (001). Результаты расчётов показывают, что асимметрия потенциала, вызванная наличием поля, способствует увеличению спинового расщепления как для первой подзоны, так и для более высоких подзон.

На рис. 4.5 и 4.6 показаны результаты расчёта спинового расщепления для различных

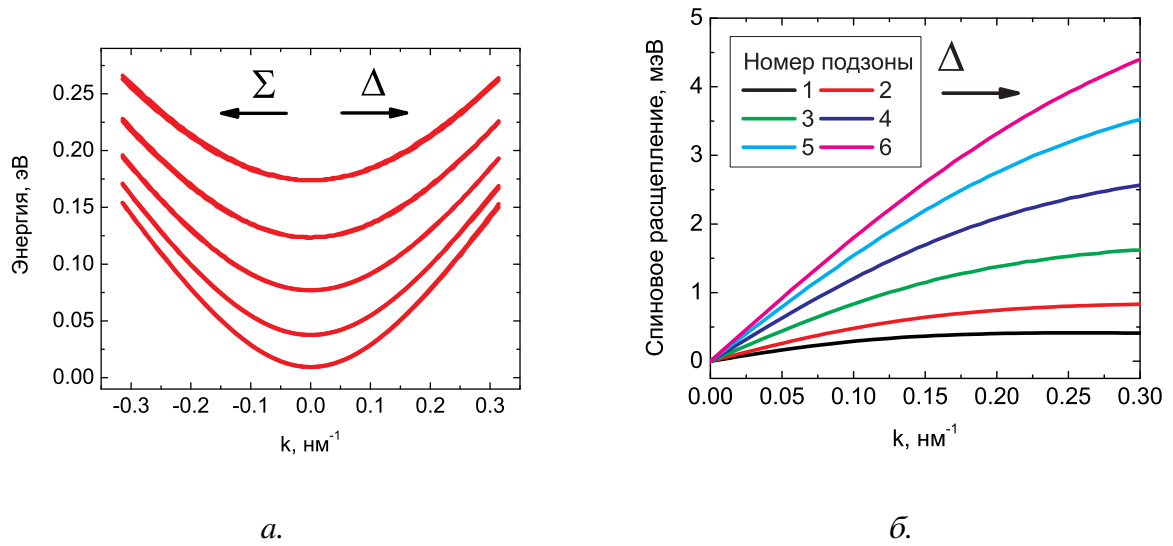


Рис. 4.3. Зонная структура (а.) и спиновое расщепление (б.) для $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}/\text{GaSb}$ КЯ с составом $x = 0,4$ шириной $w = 10 \text{ nm}$

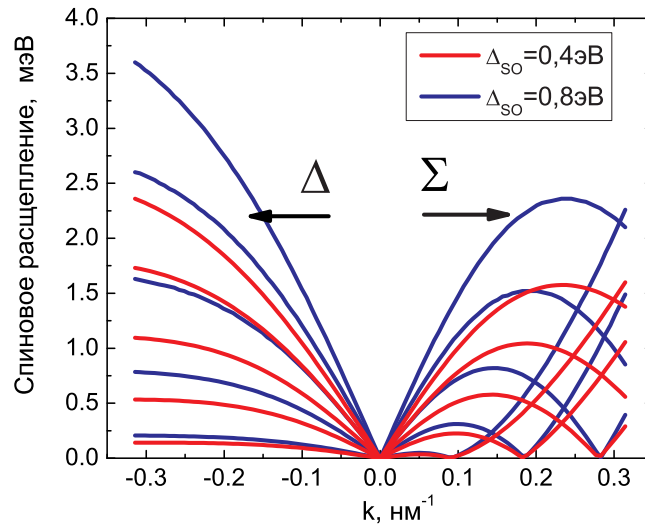


Рис. 4.4. Спиновое расщепление подзон размерного квантования симметричной КЯ в k -направлениях $[100]$ (Δ) и $[110]$ (Σ).

направлений k -пространства в зависимости от величины приложенного поля для различных значений ширины КЯ.

Как можно видеть, в малой окрестности k -пространства вблизи дна зоны проводимости

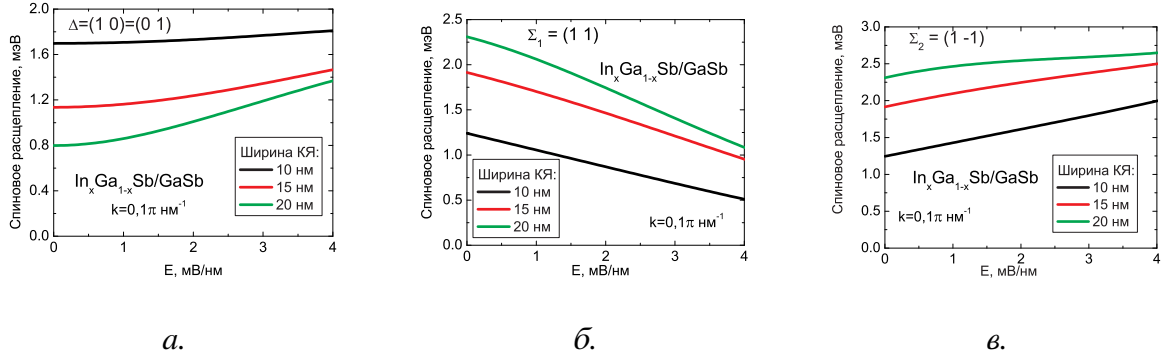


Рис. 4.5. Спиновое расщепление в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}/\text{GaSb}$ КЯ в зависимости от величины электрического поля E для различных значений ширины КЯ $W = (10; 15; 20)$ нм для направлений $(1\ 0)$ (а.), $(1\ 1)$ (б.) и $(1\ -1)$ (в.) двумерного k -пространства

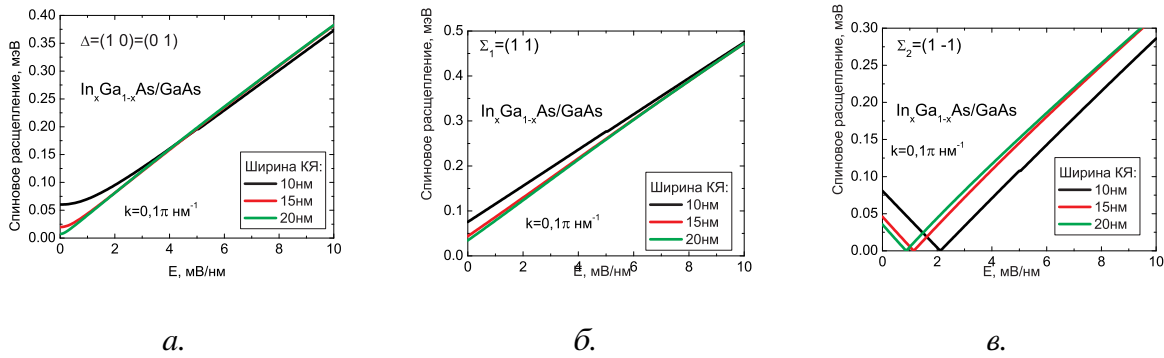


Рис. 4.6. Спиновое расщепление в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ КЯ в зависимости от величины электрического поля E для различных значений ширины КЯ $W = (10; 15; 20)$ нм для направлений $(1\ 0)$ (а.), $(1\ 1)$ (б.) и $(1\ -1)$ (в.) двумерного k -пространства

($k = 0$), спиновое расщепление ведёт себя практически линейно (рис. 4.3 и 4.4). Таким образом, поведение спинового расщепления может быть описано в рамках линейного по волновому вектору СОВ Рашба и Дрессельхауза. Для этого в дальнейшем изложении к результатам расчёта спинового расщепления будет применяться методика, описанная в следующем разделе.

4.6 Определение параметров спин-орбитального взаимодействия

Чтобы провести процедуру извлечения отдельных вкладов параметров линейного по волновому вектору СОВ Рашба и Дрессельхауза вернёмся к гамильтониану (4.1), описывающего электронные состояния в объёмном кристалле со структурой цинковой обманки.

Усредняя по волновой функции размерного квантования в направлении роста ямы, заметим, что первое слагаемое в выражении (4.1) будет соответствовать нулю [129, 130], тогда:

$$\hat{H}_{2D}^{(n)} = \beta_n(k_x\hat{\sigma}_x - k_y\hat{\sigma}_y) + \gamma_D^{(n)}(k_xk_y^2\hat{\sigma}_x - k_yk_x^2\hat{\sigma}_y), \quad (4.27)$$

где $\beta_n = \langle \frac{\partial}{\partial z} \gamma_D \frac{\partial}{\partial z} \rangle_n$ — параметр Дрессельхауза для n -ой подзоны в КЯ, а символ $\langle \dots \rangle_n$ означает усреднение по z в n -ой подзоне размерного квантования. В результате в КЯ спин-орбитальный вклад в гамильтониан преобразуется за счёт эффекта размерного квантования и содержит теперь как линейные, так и кубические по волновому вектору вклады.

Известно, что асимметрия профиля потенциала КЯ приводит к появлению линейного по волновому вектору спин-орбитального вклада Рашба в электронный гамильтониан [131]:

$$\hat{H}_R^{(n)} = \alpha_n(k_y\hat{\sigma}_x - k_x\hat{\sigma}_y), \quad (4.28)$$

где α_n — параметр Рашба для n -ой подзоны размерного квантования.

Простейшим способом создания асимметрии в структуре является введение внешнего электрического поля, приложенное в направлении роста КЯ. В этом случае параметр Рашба для каждой подзоны прямо пропорционально зависит от величины приложенного поля [131].

Пренебрегая интерфейсными вкладами в СОВ [132, 133], а также членами третьего порядка по волновому вектору в (4.28) [130], в асимметричной КЯ на основе полупроводниковых соединений со структурой цинковой обманки обычно присутствуют два вклада в СОВ (Рашба и Дрессельхауза). При этом эффективный электронный гамильтониан для n -ой подзоны размерного квантования принимает вид:

$$\hat{H}_n(k_x, k_y) = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m} + \alpha_n(k_y\hat{\sigma}_x - k_x\hat{\sigma}_y) + \beta_n(k_x\hat{\sigma}_x - k_y\hat{\sigma}_y) \quad (4.29)$$

Необходимо отметить, что метод, использованный для получения гамильтониана (4.29), применим только для малых значений волнового вектора, другими словами, он хорошо описывает дисперсию лишь в нижней подзоне размерного квантования [134].

Однако его можно использовать и в случае многозонной модели для каждой пары подзон (с противоположными спинами). Дисперсионные зависимости, численно полученные данным методом, должны соответствовать собственным значениям гамильтониана (4.29):

$$E_{n,s}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{1}{2} s \Delta E_n(\vec{k}), \quad (4.30)$$

где $\Delta E_n(\vec{k})$ — спиновое расщепление электронной подзоны размерного квантования с номером n , угловая зависимость которого в двумерном импульсном пространстве имеет вид:

$$\Delta E_n(\vec{k}) = 2k \sqrt{\alpha_n^2 + \beta_n^2 + 2\alpha_n \beta_n \sin 2\varphi}, \quad (4.31)$$

где $\varphi = \arctg(k_y/k_x)$.

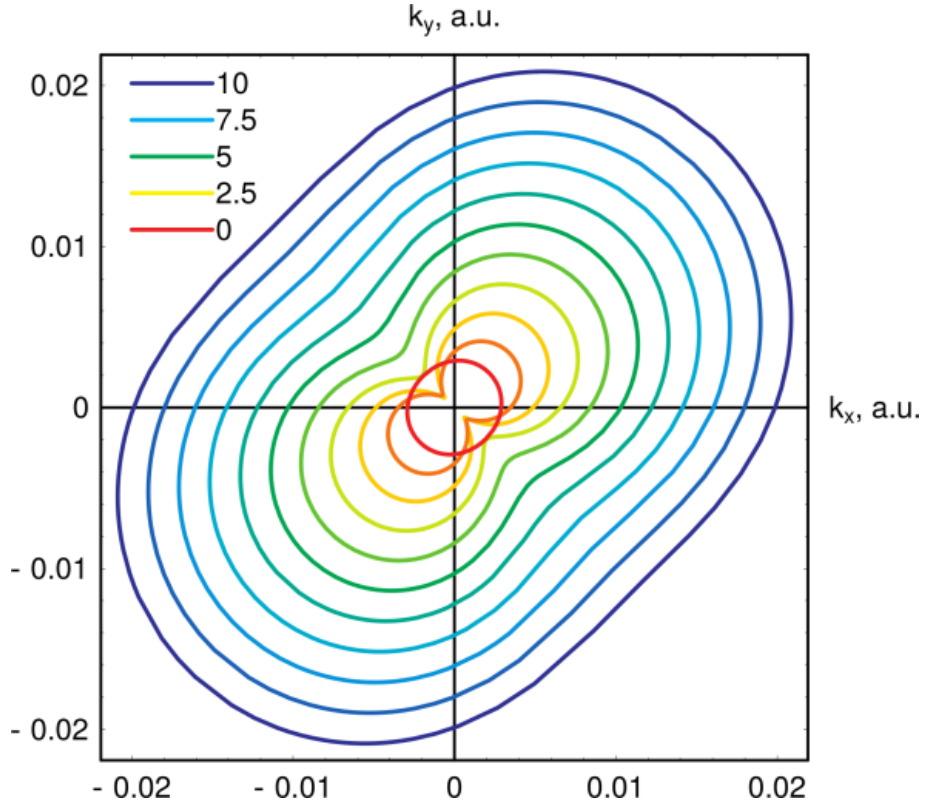


Рис. 4.7. Рассчитанные угловые зависимости линейного коэффициента спинного расщепления в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ КЯ с содержанием индия $x = 0,4$ и шириной $d = 10\text{ нм}$ для различных значений величины электрического поля ($E = 0..10\text{ мВ/нм}$)

Для непосредственного нахождения значений и вводятся линейные по коэффициенты спинного расщепления вдоль соответствующих им направлений в импульсном пространстве:

$$\Delta E_n(k_x = k/\sqrt{2}, k_y = \pm k/\sqrt{2}) = 2|\alpha_n \pm \beta_n|k = b_{n\pm}k. \quad (4.32)$$

Определяя численно коэффициенты $b_{n\pm}$, значения и для каждой подзоны размерного квантования находятся из выражения 4.32.

4.7 Параметр Дрессельхауза в симметричных квантовых ямах

Рассмотрим более детально одиночную симметричную КЯ на основе $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, выращенную в направлении (001). В симметричных структурах из-за чётности линейное СОВ содержит только вклад Дрессельхауза [135]. Поэтому далее обсуждается, как данный параметр меняется с шириной КЯ d для каждой подзоны размерного квантования.

Известно, что в простейшем случае бесконечно глубокой КЯ параметр Дрессельхауза описывается следующим выражением [135]:

$$\beta_n = \gamma_D \langle k_z^2 \rangle_n, \quad (4.33)$$

где k_z — электронный квазиимпульс в направлении квантования

$$\langle k_z^2 \rangle_n = \frac{\pi^2 n^2}{d^2}, \quad (4.34)$$

где n — номер подзоны, d — ширина КЯ.

Согласно данному приближению параметр Дрессельхауза монотонно спадает с ростом ширины КЯ для всех подзон размерного квантования. Однако результаты расчётов демонстрируют иное поведение с увеличением номера подзоны. На рис. 4.8 показан результат расчёта параметра Дрессельхауза как функции ширины КЯ для трёх нижних подзон в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ КЯ. Как можно видеть, лишь для первой подзоны зависимость $\beta_1(d)$ подчиняется выражению (4.34), т.е. монотонно спадает с ростом ширины КЯ. С ростом номера подзоны зависимость $\beta_n(d)$ становится более нетривиальной, более того, для третьей подзоны происходит смена знака СОВ Дрессельхауза.

Одной из причин подобного поведения является тот факт, что выражение (4.34) является некорректным для случая КЯ конечной глубины. В действительности электронная ВФ не является полностью локализованной в области ямы и проникает в барьерные слои [135]. Степень данного подбарьерного проникновения существенно зависит от типа гетеросоединения и геометрии

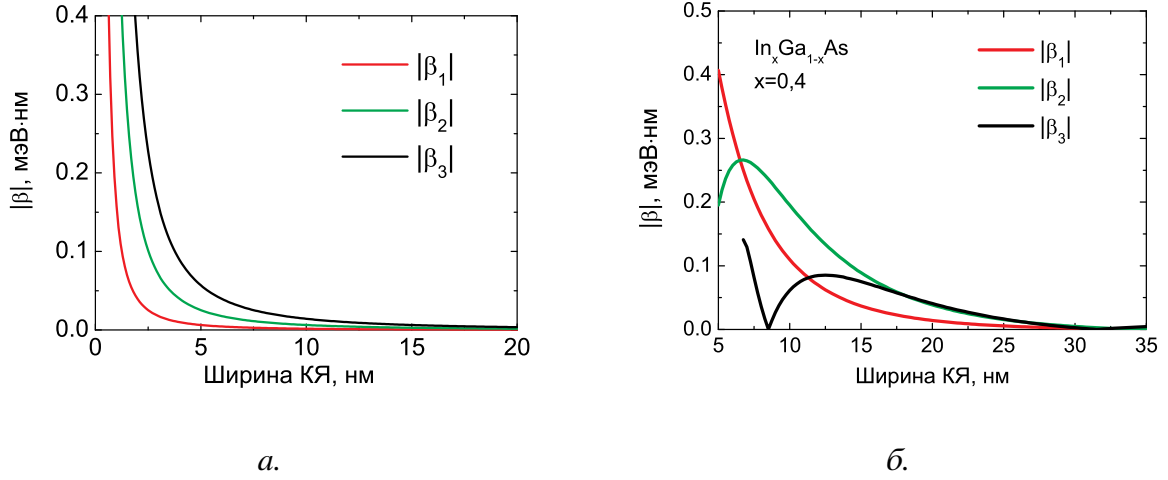


Рис. 4.8. Модуль параметра Дрессельхауза для бесконечной КЯ (а.); модуль параметра Дрессельхауза в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} / \text{GaAs}$ ($x = 0,4$) КЯ для первых трёх подзон в зависимости от ширины КЯ (б.).

структуры. Для объяснения нетривиального поведения зависимости $\beta_n(d)$, наблюдаемого в результатах численного расчёта, необходимо более детально рассмотреть электронные состояния в КЯ. Для КЯ конечной глубины величина усреднённого СОВ Дрессельхауза является произведением ВФ в областях ямы и барьеров на соответствующую каждой из этих областей объёмную константу Дрессельхауза γ_D каждой из областей соответственно. Из выражения (4.33) получаем:

$$\beta_n = \left\langle \frac{\partial}{\partial z} \gamma_D \frac{\partial}{\partial z} \right\rangle_n. \quad (4.35)$$

Поскольку объёмная константа Дрессельхауза для твёрдого раствора $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ сильно зависит от содержания индия [136], она может дать различный вклад в значение параметра Дрессельхауза вплоть до смены знака. Таким образом, параметр Дрессельхауза в КЯ может быть немонотонным с ростом номера подзоны и ширины КЯ [137].

4.8 Зависимость параметра Дрессельхауза от состава в симметричной квантовой яме

В данном разделе предлагается подход, позволяющий объяснить нетривиальное поведение параметра Дрессельхауза $\beta_n(d)$ в КЯ произвольного состава и ширины для различных подзон

размерного квантования.

Проанализируем параметр Дрессельхауза $\beta_n(d)$, полагая, что для n -ой подзоны он складывается из компонентов, соответствующих областям ямы и барьера, вычисляемых по отдельности (4.36). В случае симметричных КЯ, для вычисления огибающих волновых функций можно воспользоваться приближением эффективной массы [138], описанным в главе 2. Необходимо отметить увеличение доли проникновения ВФ в подбарьерные области с ростом номера подзоны.

Далее, вычисляя параметр $\beta_n(d)$, используем объёмное значение постоянной Дрессельхауза γ_D каждого из материалов гетероструктуры $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs [139], усреднённое по ВФ в соответствующей области. Значение параметра Дрессельхауза n -й подзоны размерного квантования запишем как

$$\beta_n = \beta_n^{(A)} + \beta_n^{(B)},$$

$$\beta_n^{(A,B)} = \gamma_D^{(A,B)} \int_{A,B} \psi_n^* \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi_n(z) dz, \quad (4.36)$$

где A — область ямы (материал $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$), B — область барьера (материал GaAs), $\psi_n(z)$ — огибающая ВФ, полученная при помощи метода эффективной массы.

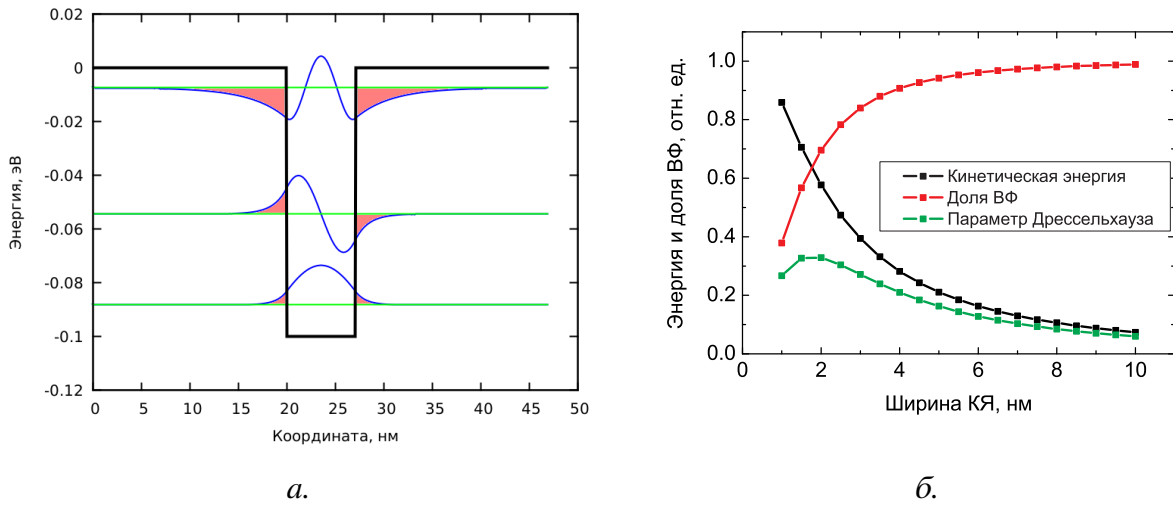


Рис. 4.9. Проникновение ВФ под барьер в зависимости от номера подзоны в одиночной КЯ (а.) и образование немонотонности параметра Дрессельхауза под влиянием подбарьерного проникновения (б.)

С номером подзоны размерного квантования происходит рост доли проникновения ВФ в подбарьерную область, что приводит к увеличению роли параметров материала барьера. Поскольку наибольший интерес вызывает поведение параметра Дрессельхауза для третьей подзоны

(рис. 4.8), рассмотрим её более подробно. На рис. 4.10а показано слагаемое параметра Дрессельхауза $\beta_3^{(A)}(d)$ в области A и (рис. 4.10б) суммарное значение параметра $\beta_3(d)$ в зависимости от ширины КЯ для третьей подзоны и различного состава КЯ.

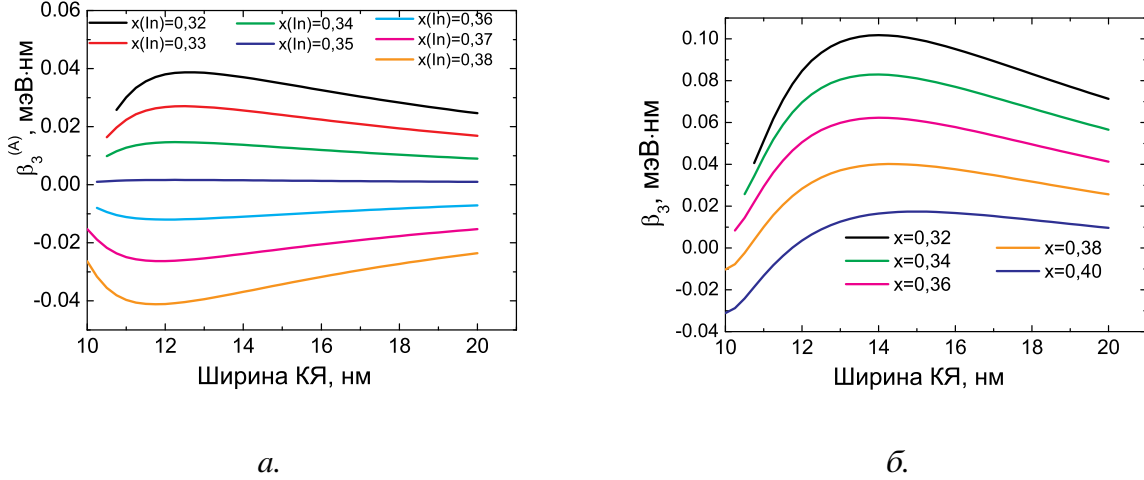


Рис. 4.10. Компонента параметра Дрессельхауза $\beta_3^{(A)}$, вычисленная для области ямы в третьей подзоне (а.) и суммарное (для областей ямы и барьера) значение параметра Дрессельхауза $\beta_3 = \beta_3^{(A)} + \beta_3^{(B)}$ в третьей подзоне (б.) в зависимости от ширины КЯ для различных значений содержания индия (x) в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ КЯ.

Суммируя компоненты параметра Дрессельхауза, рассчитанные для областей A и B в соответствии с (4.36) получаем зависимость $\beta_3(d)$, которая также имеет немонотонный характер. Из выражения (4.36) следует, что параметр Дрессельхауза $\beta_3^{(A)}(d)$ с точностью до константы равен произведению доли волновой функции, локализованной в КЯ, на кинетическую энергию частицы. Тогда немонотонное поведение параметра $\beta_3^{(A)}(d)$ с ростом ширины КЯ можно объяснить комбинацией двух физических эффектов: увеличением локализации ВФ в области ямы A (рис. 4.9) и одновременным уменьшением кинетической энергии подзоны.

Изменение содержания индия в КЯ приводит к изменению разрыва зон между GaAs и $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и, в результате, эффективной глубины ямы для каждой из подзон. Можно сделать вывод, что изменение состава КЯ приводит к изменению доли ВФ в областях ямы и барьеров, что в свою очередь, приводит к изменению соответствующих вкладов в параметр Дрессельхауза. Таким образом, немонотонность сохраняется при изменении содержания индия в составе КЯ. Более того, начиная с определённого состава $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, постоянная Дрессельхауза Γ_D меняет знак [139]. Как видно, данная зависимость (рис. 4.10б) качественно соответствует поведению параметра β_3 (при соответствующем содержании индия), полученного при помощи $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -метода.

Таким образом, результаты и $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -расчётов, и приближения эффективной массы показывают, что усреднённый параметр СОВ Дрессельхауза для высших подзон размерного квантования может обращаться в нуль при определённых параметрах КЯ.

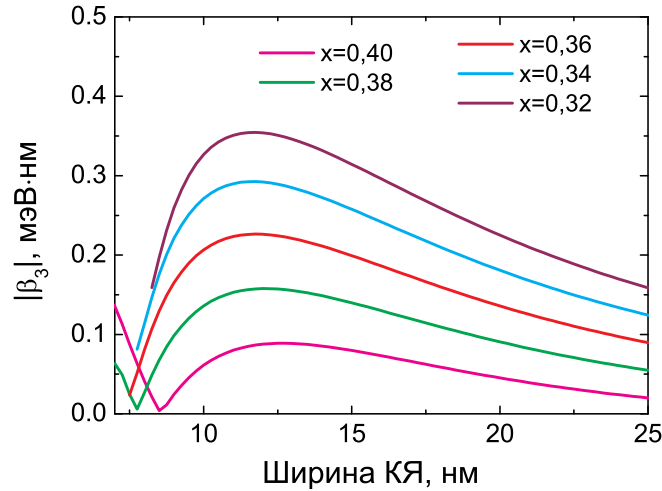


Рис. 4.11. Модуль параметра Дрессельхауза для третьей подзоны в зависимости от ширины КЯ и содержания индия (x) в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs КЯ

Необходимо заметить, что данный результат является специфичным для конкретных материалов, поскольку объёмная постоянная Дрессельхауза γ меняется в большом диапазоне значений при переходе от ямы к барьеру. Результаты показывают, что подобное поведение параметра Дрессельхауза недостижимо для КЯ на основе материалов $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ /GaSb ввиду отсутствия смены знака у постоянной γ_D при любом составе $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$.

4.9 Режим устойчивого спинового хеликса в асимметричном потенциале, индуцированном поперечным электрическим полем

Далее рассматриваются структуры с асимметричной КЯ на основе $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ различной ширины, в которых присутствуют СОВ как Рашба, так и Дрессельхауза. В структурах создаётся асимметричный потенциал, индуцированный внешним электрическим полем ($E = 0-0,4$ мВ/нм), приложенным в направлении роста структуры. Путём численного решения уравнения (4.8), проводится расчёт энергетического спектра с учётом СОВ, описываемый суперпозицией вкладов

Рашба и Дрессельхауза. Одной из задач, решаемых в данном разделе, является нахождение условий, соответствующих реализации состояния устойчивого спинового хеликса [84, 94, 140] в зависимости от ширины КЯ и содержания индия. Известно [94], что для направления роста КЯ (001) состояние спинового хеликса соответствует равенству параметров СОВ Рашба и Дрессельхауза ($|\alpha_n| = |\beta_n|$). С использованием метода, описанного в разд. 4.6, проводится расчёт параметров СОВ в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ и $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}/\text{GaSb}$ КЯ для каждой из подзон в зависимости от приложенного поперечного электрического поля (см. рис. 4.12).

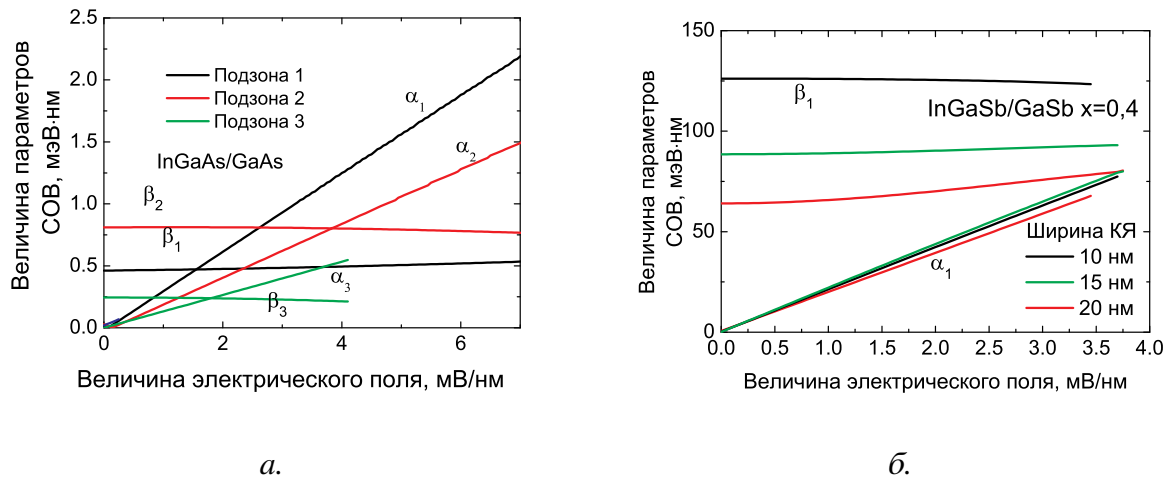


Рис. 4.12. Параметры Рашба и Дрессельхауза (α_n и β_n) в зависимости от величины электрического поля для первых трёх подзон в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ КЯ для содержания индия $x = 0,4$ и ширины КЯ $d = 10$ нм (а.); параметры Рашба и Дрессельхауза для первой подзоны (α_1 и β_1) в зависимости от электрического поля в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}/\text{GaSb}$ КЯ для содержания индия $x = 0,4$ для различных значений ширины КЯ (б.)

Очевидно, состояние спинового хеликса легко достижимо для первой подзоны даже для сравнительно небольшого содержания индия ($x \approx 0,2$). В то же время можно показать, что увеличение содержания индия позволяет получать состояние спинового хеликса для более высоких номеров подзон. Таким образом, для КЯ с высоким содержанием индия ($x \approx 0,4$) при приложении электрического поля возможно получение спинового хеликса для различных комбинаций геометрии и состава гетероструктуры. На рис. 4.12 показаны точки пересечения параметров СОВ Рашба и Дрессельхауза $|\alpha_n| = |\beta_n|$, соответствующие состояниям хеликса для первых трёх подзон.

Как видно из результатов (рис. 4.12), параметр α_n , индуцированный структурной асимметрией, практически линейно зависит от электрического поля и почти не зависит от глуби-

ны КЯ [141]. При этом параметр Дрессельхауза практически не меняется с ростом поля и определяется в основном номером подзоны, содержанием индия и шириной КЯ. Поскольку параметр Рашба хорошо контролируется электрическим полем, можно сделать вывод о том, что для реализации режима спинового хеликса достаточно подобрать соответствующее затворное напряжение в структуре, ввиду того, что параметр Дрессельхауза определяется исключительно параметрами структуры. Кроме того, благодаря рассмотренному выше немонотонному поведению параметра Дрессельхауза электрическое поле образования спинового хеликса (далее в тексте работы обозначено как «поле хеликса») также ведёт себя нетривиально. Например, на рис. 4.12 можно видеть, что поле хеликса для третьей подзоны выше, чем для второй подзоны для заданного значения ширины КЯ.

Немонотонный характер поведения СОВ Дрессельхауза и связанные с ним эффекты очень интересны с фундаментальной точки зрения. Строго говоря, наблюдаемые в эксперименте электронные свойства КЯ, определяются, в основном, первой подзоной ввиду её большей заселённости носителями. Поэтому далее будут рассматриваться свойства СОВ в применении к первой подзоне. В частности, одной из задач диссертационного исследования было доказательство того факта, что даже для первой подзоны режим спинового хеликса может быть достигнут для широкого диапазона геометрических и материальных параметров КЯ и значений электрического поля, достижимых в условиях реального эксперимента.

Были рассмотрены зависимости для поля хеликса от состава и ширины КЯ. Полученные результаты приведены на рис. 4.13. Как можно видеть, поле хеликса практически линейно убывает с ростом содержания индия (10-процентное изменение содержания индия соответствует изменению поля хеликса на величину около 0,5 мВ/нм). Также показано, что для заданного значения содержания индия поле хеликса быстро спадает с ростом ширины КЯ.

На рис. 4.14 показано обобщение полученных в ходе работы результатов моделирования для асимметричных КЯ. В частности, здесь показана величина параметра СОВ для режима спинового хеликса в зависимости от поля хеликса для различных величин содержания индия. Таким образом, комбинируя ширину КЯ и содержание индия, возможна реализация режима спинового хеликса с различной частотой прецессии. Также необходимо отметить, что полученные значения поля хеликса могут быть легко получены в эксперименте, что важно для возможных практических приложений данных структур.

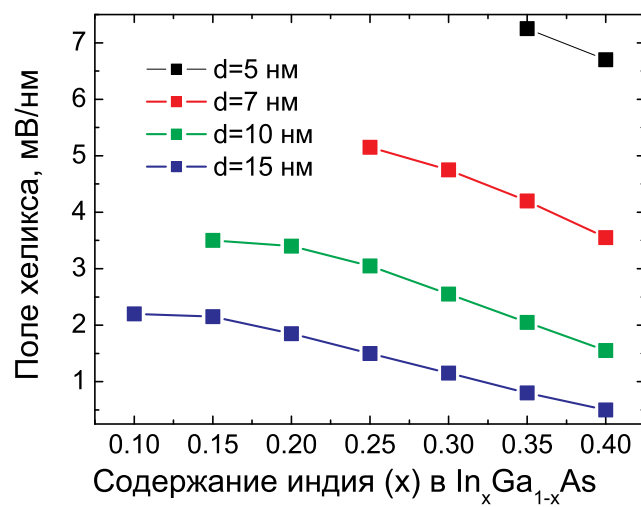


Рис. 4.13. Поле хеликса для первой подзоны ($|\alpha_1| = |\beta_1|$) в зависимости от содержания индия (x) в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs КЯ для различных значений ширины КЯ (5, 7, 10, 15 нм).

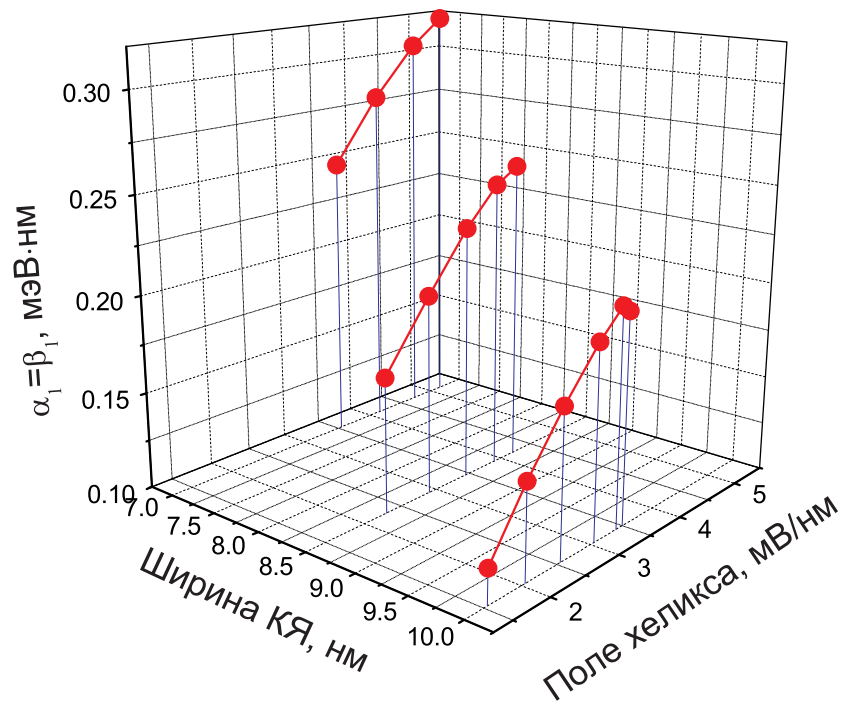


Рис. 4.14. Величина параметров СОВ, соответствующая режиму спинового хеликса для первой подзоны ($|\alpha_1| = |\beta_1|$), представленная как функция ширины $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs КЯ ($d = 7; 8,5; 10$ нм) и поля хеликса в зависимости от содержания индия ($x = 0,1-0,4$).

4.10 Результаты и выводы по главе 4

1. Используя численное решение шрёдингеровского уравнения на основе гамильтониана Кейна был создан алгоритм расчёта спинового расщепления и параметров СОВ для каждой из подзон размерного квантования. Исследованы зависимости параметров СОВ в структурах на основе КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ и $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}/\text{GaSb}$.
2. Величина параметров спинового расщепления определяется типом материалов, геометрией структуры, номером подзоны размерного квантования. Учёт подбарьерного проникновения огибающих волновых функций электронов позволяет объяснить немонотонное поведение параметра СОВ Дрессельхауза в симметричной КЯ.
3. Установлено, что в симметричных квантовых ямах $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ при определённой ширине и химическом составе барьеров может исчезать линейное по волновому вектору СОВ.
4. В данной работе продемонстрирована возможность управления параметрами спин-орбитального взаимодействия при помощи внешнего электрического поля, в том числе создания условий равенства модулей параметров Рашба и Дрессельхауза $|\alpha_n/\beta_n| = 1$, соответствующего состоянию устойчивого спинового хеликса.

Заключение

В данной работе проведены исследования энергетических, оптических, спиновых характеристик различных квантово-размерных структур: гетероструктур с квантовыми ямами и δ -легированными слоями, а также полупроводниковых нанопроволок и нанотрубок. Путём самосогласованного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона, используя конечно-разностную схему с дискретизацией в координатном пространстве, численно рассчитываются состояния размерного квантования. Полученная квантовая концентрация используется для определения и анализа вольт-фарадных характеристик и распределения электронного газа в структурах с различной геометрией и степенью легирования. Путём непосредственных численных расчетов, в рамках 8-зонной модели Кейна предложена методика, позволяющая оценить индивидуальный вклад СОВ Дрессельхауза и Рашба в зоне проводимости КЯ на основе полупроводников $A^{III}B^V$ со структурой цинковой обманки в присутствии поперечного однородного электрического поля.

Таким образом, разработан единый подход позволяющий уточнить истинную геометрию структуры, сопоставить результаты расчётов спектра и реального профиля потенциала, скорректировать параметры роста для улучшения рабочих характеристик приборов нанoeлектроники. Актуальность работы обусловлена широким спектром возможного применения гетероструктур на основе $A^{III}B^V$ в современных нано- и оптоэлектронных приборах, при создании НЕМТ-транзисторов и приборов спинтроники.

Основные результаты можно свести к следующим:

1. Разработанный алгоритм численного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона позволил провести расчёт энергетического спектра, профиля зоны проводимости, вольт-фарадных характеристик для структур на основе материалов InGaAs/GaAs, содержащих квантовые ямы и δ -легированные слои. Выявлены характерные особенности профилей наблюдаемой концентрации, вызванные присутствием различных слоёв структур. Показано, что взаимное расположение квантовой ямы и δ -слоя оказывает влияние на транспортные и оптические свойства данных структур.
2. Предложен комплексный подход к анализу гетероструктур с туннельно-связанными кван-

товыми ямами InGaAs/GaAs, использующий как экспериментальные, так и теоретические методы исследования. Подобные исследования и расчеты могут служить методом диагностики и прогнозирования качества гетерограниц в структурах, выращиваемых для оптоэлектронных приборов.

3. Исследованы закономерности образования электронного газа в структурах с двумерным квантовым ограничением — InAs гексагональных нанопроволоках и нанотрубках. При помощи алгоритма решения согласованных уравнений Шрёдингера и Пуассона проведено качественное и количественное описание неравномерности азимутального и радиального распределения концентрации носителей в данных структурах. Проведено численное моделирование осцилляций энергетического спектра и проводимости в нанотрубках InAs с произвольным поперечным сечением, возникающих вследствие эффекта типа Ааронова-Бома. Показано, что величина щели энергетического спектра, определяется степенью вращательной симметрии структуры.
4. На основе численного решения шрёдингеровского уравнения на основе гамильтониана Кейна был создан алгоритм расчёта спинового расщепления и параметров СОВ для каждой из подзон размерного квантования. При помощи 8-зонной модели Кейна, используя конечно-разностную схему с дискретизацией в координатном пространстве, проведен расчет спинового расщепления в квантовых ямах $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}/\text{GaSb}$. Из анализа величины спинового расщепления получены значения отдельных вкладов линейных по волновому вектору параметров Рашба и Дрессельхауза. Показано, что в структурах $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ при определенной величине электрического поля возможно равенство параметров спин-орбитального взаимодействия, что является условием формирования устойчивых спиновых хеликсов.

Благодарности

Автор выражает свою благодарность своему научному руководителю, доц. С.В. Хазановой за постановку интересной научной задачи и общее руководство. Также благодарю студентов и выпускников физического факультета ННГУ А. Еремеева, О. Голикова, Н. Григорьеву, А. Белова за плодотворные споры и обсуждения по научным и техническим вопросам. Выражаю благодарность сотрудникам НИФТИ и физического факультета ННГУ Н.В. Байдусю, С.В. Тихову, Б.Н. Звонкову, Н.В. Малехоновой и проф. Д.А. Павлову за предоставленные экспериментальные результаты для сравнения с численным анализом. Отдельно хочу поблагодарить сотрудников Forschungszentrum Jülich Н.В. Демарину и D. Grützmacher за помощь и полезные советы и замечания при разработке темы полупроводниковых нанопроволок. Кроме того, огромное спасибо ст. преп. кафедры ТФ ННГУ А.А. Конакову за большое количество советов и дискуссий по научным и общим вопросам, особенно по теме спин-зависимых явлений. Также благодарю своих коллег из корпорации Intel, особенно А. Ерёменко, Б. Воинова, R. Kotlyar, R. Golizadeh-Mojarad и S. Sea за их поддержку и ценные советы.

Наконец, автор благодарит своих родителей и Э. Удычак за оказанную ими неоценимую поддержку и весь коллектив кафедры ЭТТ ННГУ за ряд ценных замечаний и советов, способствовавших улучшению диссертационной работы.

Список сокращений и условных обозначений

$\mathcal{F}_n$ Интеграл Ферми порядка n

C Электрическая ёмкость

e Заряд электрона

$k_B T$ Тепловая энергия

m_{DOS} Эффективная масса плотности состояний

n_{app} Профиль наблюдаемой (apparent) концентрации

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ Твёрдый раствор арсенид индия галлия

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ Твёрдый раствор антимонид индия галлия

BIA Объёмно-инверсионная симметрия (англ. Bulk Inversion Asymmetry)

HEMT Транзистор с высокой подвижностью заряда

InAs Арсенид индия

SIA Структурно-инверсионная симметрия (англ. Structure Inversion Asymmetry)

ВФ Волновая функция

ВФХ Вольт-фарадная характеристика

КРМ Метод конечных разностей

КЯ Квантовая яма

COB Спин-орбитальное взаимодействие

СПЭМ Сканирующая просвечивающая электронная микроскопия

СЭМ Сканирующая электронная микроскопия

ТСКЯ Туннельно-связанная квантовая яма

ФЛ Фотолюминесценция

ФП фотопроводимость

Список публикаций по теме

диссертационного исследования

Статьи, опубликованные в журналах, включенных в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени доктора и кандидата наук:

[A1]. Туннельно-связанные квантовые ямы InGaAs/GaAs: структура, состав и энергетический спектр С.В. Хазанова, Н.В. Байдусь, Б.Н. Звонков, Д.А. Павлов, Н.В. Малехонова, **В.Е. Дегтярев**, Д.С. Смотрин, И.А. Бобров // ФТП, Т. 46, В. 12, 2012 г., с. 1510–1514

[A2]. Адмиттанс кольцевых диодных структур с квантовыми ямами InGaAs/InAlAs/InP С.В. Тихов, Н.В. Байдусь, А.А. Бирюков, **В.Е. Дегтярев** // ФТП, Т. 46, В. 12, 2012 г., с. 1561–1565

[A3]. Моделирование эффективного профиля концентрации в гетероструктурах InGaAs/GaAs с δ -легированными слоями С.В. Хазанова, **В.Е. Дегтярев**, С.В. Тихов, Н.В. Байдусь // ФТП, Т. 49, В. 1, 2015 г., с. 53–57

[A4]. Влияние технологических параметров роста на характеристики двойных туннельно-связанных ям InGaAs/GaAs С.В. Хазанова, **В.Е. Дегтярев**, Н.В. Малехонова, Д.А. Павлов, Н.В. Байдусь // ФТП, Т. 49, В. 1, 2015 г., с. 58–62

[A5]. Влияние пространственного расположения δ -слоя Si на оптоэлектронные свойства гетеронаноструктур с квантовой ямой InGaAs/GaAs Н.С. Волкова, А.П. Горшков, С.В. Тихов, Н.В. Байдусь, С.В. Хазанова, **В.Е. Дегтярев**, Д.О. Филатов // ФТП, Т. 49, В. 2, 2015 г., с. 145–148

[A6]. Features of electron gas in InAs nanowires imposed by interplay between nanowire geometry, doping and surface states **V.E. Degtyarev**, S.V. Khazanova, N.V. Demarina // Nature: Scientific Reports, volume 7, 2017, 3411

[A7]. Влияние электрического поля на соотношение параметров Рашба и Дрессельхауза в гетероструктурах $A^{III}B^V$ **В.Е. Дегтярев**, С.В. Хазанова, А.А. Конаков // ФТП, Т. 51, № 11, с. 1462–1467 (2017)

Тезисы докладов, опубликованных на всероссийских, международных и региональных конференциях:

[A8]. Влияние флуктуаций состава и эффекта сегрегации на оптические свойства туннельно-связанных квантовых ям InGaAs/GaAs Н.В. Байдусь, С.В. Хазанова, **В.Е. Дегтярев** // Сборник трудов XV Международного симпозиума по нанофизике и нанoeлектронике, 14–18 марта 2011г., Нижний Новгород, с. 531–532

[A9]. Расчёт энергетических характеристик двойных квантовых ям InGaAs/GaAs в зависимости от технологических параметров **В.Е. Дегтярев**, С.В. Хазанова // Труды научной студенческой конференции физического факультета ННГУ 2011 года

[A10]. Численный расчёт энергетических характеристик двойных квантовых ям InGaAs/GaAs для различных параметров роста **В.Е. Дегтярев**, С.В. Хазанова // Тезисы докладов тринадцатой всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и нанoeлектронике, 21–25 ноября 2011, г. Санкт-Петербург, с. 51

[A11]. Исследование реального энергетического спектра туннельно-связанных квантовых ям InGaAs/GaAs структурными и фотоэлектрическими методами С.В. Хазанова, Н.В. Байдусь, Б.Н. Звонков, Д.А. Павлов, Н.В. Малехонова, **В.Е. Дегтярев**, Д.С. Смотрин // Сборник трудов XVI Международного симпозиума по нанофизике и нанoeлектронике, 12–16 марта 2012 г., Нижний Новгород, с. 415–416

[A12]. Адмиттанс кольцевых диодных структур с квантовыми ямами InGaAs/InAlAs на подложке i-InP С.В. Тихов, Н.В. Байдусь, А.А. Бирюков // Сборник трудов XVI Международного симпозиума по нанофизике и нанoeлектронике, 12–16 марта 2012 г., Нижний Новгород, с. 406–407

[A13]. Численный расчёт концентрации носителей в гетероструктурах с δ -легированными слоями **В.Е. Дегтярев**, С.В. Хазанова // Сборник тезисов докладов научной студенческой конференции физического факультета ННГУ. — Нижний Новгород, 2012 г., с. 16–17

[A14]. Исследование реального профиля распределения In в квантовых ямах InGaAs/GaAs методами просвечивающей электронной микроскопии и энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии Н.В. Малехонова, Д.А. Павлов, С.В. Хазанова, Н.В. Байдусь, Б.Н. Звонков, **В.Е. Дегтярев**, Д.С. Смотрин, А.И. Бобров // Сборник тезисов докладов научной студенческой конференции физического факультета ННГУ. — Нижний Новгород, 2012 г., с. 24–25

[A15]. Numerical calculations of concentration profile for InGaAs/GaAs heterostructures with δ -doping layers S.V. Khazanova, **V.E. Degtyarev** // Proc. of The International Conference "Micro-

and Nanoelectronics — 2012” (ICMNE-2012), October 1–5, 2012 at the “Lipki” resort in Zvenigorod, Moscow Region, Russia, P. 1-17

[A16]. Численный расчёт концентрации носителей в структурах, содержащих квантовые ямы и δ -легированные слои на основе InGaAs/GaAs **В.Е. Дегтярев**, С.В. Хазанова // Тезисы докладов четырнадцатой всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике, 26–30 ноября 2012 г., г. Санкт-Петербург, с. 46

[A17]. Исследование распределения примеси в поперечном срезе гетеронаноструктур типа $A^{III}B^V$ Н.В. Малехонова, Д.А. Павлов, А.И. Бобров, **В.Е. Дегтярев**, Н.В. Байдусь // Форум молодых учёных. Тезисы докладов., — Нижний Новгород: 2013г., т. 1., с. 172–174

[A18]. Оптимизация параметров роста двойных туннельно-связанных квантовых ям InGaAs/GaAs **В.Е. Дегтярев**, С.В. Хазанова // Тезисы докладов пятнадцатой всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике, 25–29 ноября 2013 г., г. Санкт-Петербург., с. 43

[A19]. Влияние пространственного расположения δ -слоя Si на оптоэлектронные свойства гетеронаноструктур с квантовой ямой InGaAs/GaAs Н.С. Волкова, С.В. Тихов, А.П. Горшков, Н.В. Байдусь, **В.Е. Дегтярев** // Труды XVIII Международного симпозиума «Нанофизика наноэлектроника», 10–14 марта 2014 г., Нижний Новгород, т. 2, стр. 421–422

[A20]. Моделирование эффективного профиля концентрации в гетероструктурах InGaAs/GaAs с δ -легированными слоями С.В. Хазанова, **В.Е. Дегтярев**, Н.В. Байдусь, С.В. Тихов // Труды XVIII Международного симпозиума «Нанофизика наноэлектроника», 10–14 марта 2014 г., Нижний Новгород, т. 2, стр. 658–659

[A21]. Влияние технологических параметров роста на характеристики двойных туннельно-связанных ям InGaAs/GaAs С.В. Хазанова, Н.В. Байдусь, **В.Е. Дегтярев**, Д.А. Павлов, Н.В. Малехонова // Труды XVIII Международного симпозиума «Нанофизика наноэлектроника», 10–14 марта 2014 г., Нижний Новгород, т. 2, стр. 660–661

[A22]. Влияние геометрии наногетероструктур InGaAs/GaAs на оптические и транспортные свойства С.В. Хазанова, **В.Е. Дегтярев**, Н.В. Байдусь // Сборник тезисов V всероссийской конференции и школы молодых учёных и специалистов «Физические и физико-химические основы ионной имплантации», 27–31 октября 2014, Нижний Новгород, стр. 113–114

[A23]. Влияние параметров поперечного сечения на энергетический спектр в InAs квантовых нитях **В.Е. Дегтярев**, С.В. Хазанова, Н.В. Демарина // Тезисы докладов шестнадцатой всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике, 24–28 ноября 2014 г., г. Санкт-Петербург., с. 51

[A24]. Исследование электрофизических и транспортных свойств гетероструктур InGaAs/GaAs с δ -легированием С.В. Хазанова, **В.Е. Дегтярев**, Н.В. Байдусь // Труды XIX международного симпозиума «Нанопфизика и Наноэлектроника», 10–14 марта 2015 г., Нижний Новгород, т. 2, стр. 691–692

[A25]. Энергетический спектр электронов в InAs квантовых нитях с поперечным сечением реальной формы С.В. Хазанова, **В.Е. Дегтярев**, Н.В. Демарина // Труды XIX международного симпозиума «Нанопфизика и Наноэлектроника», 10–14 марта 2015 г., Нижний Новгород, т. 2, стр. 693–694

[A26]. Особенности электронного газа в нанотрубках на основе InAs **В.Е. Дегтярев**, А.В. Еремеев, С.В. Хазанова, Н.В. Демарина // Тезисы докладов XVII Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто - и наноэлектронике, стр. 94

[A27]. Численный расчет электронного спектра в нанотрубках на основе InAs С.В. Хазанова, **В.Е. Дегтярев**, Н.В. Демарина, А.В. Еремеев // Труды XX международного симпозиума «Нанопфизика и Наноэлектроника», 14–18 марта 2016 г., стр. 764–765, Нижний Новгород

[A28]. Расчет спинового расщепления в гетероструктурах на основе полупроводников $A^{III}B^V$ **В.Е. Дегтярев**, С.В. Хазанова, А.А. Конаков, Ю.А. Данилов // Труды XX международного симпозиума «Нанопфизика и Наноэлектроника», 14–18 марта 2016 г., стр. 556–557, Нижний Новгород

[A29]. Численный расчёт спин-орбитального взаимодействия Рашбы и Дрессельхауза в квантовых ямах на основе материалов $A^{III}B^V$ **В.Е. Дегтярев**, А.А. Конаков, С.В. Хазанова // Тезисы докладов XVIII Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто - и наноэлектронике, стр. 70

[A30]. Численный расчёт параметров Рашбы и Дрессельхауза в асимметричных квантовых ямах на основе $A^{III}B^V$ **В.Е. Дегтярев**, С.В. Хазанова, А.А. Конаков // Труды XXI международного симпозиума «Нанопфизика и Наноэлектроника», 13–16 марта 2017 г., стр. 574–575, Нижний Новгород

[A31]. Электронная проводимость планарных InAs нанопроволок, выращенных на Si С.В. Хазанова, **В.Е. Дегтярев**, Н.В. Демарина // Труды XXI международного симпозиума «Нанопфизика и Наноэлектроника», 13–16 марта 2017 г., стр. 754–755, Нижний Новгород

[A32]. SU(2) Symmetric Spin-Orbit Coupling in 2D Electron System: the General Description for Quantum Wells with an Arbitrary Growth Direction A. Kozulin, A. Malyshev, V. Degtyarev, S. Khazanova, N. Kirillova, A. Konakov // Joint Conference: EP2DS-22 / MSS-18, Penn State University, Poster Abstract List, July 31–August 4 2017, p. 113

[A33]. Спиновые хеликсы в двумерных полупроводниковых системах А.С. Козулин, А.И. Малышев, **В.Е. Дегтярев**, С.В. Хазанова, А.А. Конаков // Тезисы докладов XIII Российской конференции по физике полупроводников, 2017 г., с. 273, Екатеринбург

[A34]. Formation of Persistent Spin Helices in Semiconductor Quantum Wells with an Arbitrary Growth Direction A.S. Kozulin, **V.E. Degtyarev**, A.I. Malyshev, S.V. Khazanova, D.M. Artamonov, A.A. Konakov // EMN Bangkok Meeting 2017, Program and Abstract, November 12–16, p. 13, Bangkok, Thailand

[A35]. Спин-орбитальное взаимодействие в полупроводниковых квантовых ямах с произвольным направлением роста Д.М. Артамонов, А.Р. Зайнагутдинов, Д.А. Кулаков, **В.Е. Дегтярев**, С.В. Хазанова, А.А. Конаков // Труды XXII международного симпозиума «Нанопизика и Нанозлектроника», 12–15 марта 2018 г., Т. 2, стр. 544, Нижний Новгород

[A36]. Расчет параметров параметров Рашба и Дрессельхауза в InGaAs/GaAs квантовых ямах конечной глубины **В.Е. Дегтярев**, С.В. Хазанова, А.С. Белов, А.А. Конаков // Труды XXII международного симпозиума «Нанопизика и Нанозлектроника», 12–15 марта 2018 г., Т. 2, стр. 580–581, Нижний Новгород

[A37]. Моделирование спектра фотолюминесценции глубоких InGaAs/GaAs квантовых ям с учетом деформации в эпитаксиальных слоях С.В. Хазанова, **В.Е. Дегтярев**, Н.В. Байдусь, Н.Н. Григорьева // Труды XXII международного симпозиума «Нанопизика и Нанозлектроника», 12–15 марта 2018 г., Т. 2, стр. 799–800, Нижний Новгород

Список литературы

1. Павлов Л.П. Методы измерения параметров полупроводников. М.: Высшая школа, 1987, 238с. .
2. Kroemer, H. Measurement of isotype heterojunction barriers by C-V-profiling / H. Kroemer, Wu-Yi Chien, J.S. Harris (Jr.), E.D. Edwall // Appl. phys. lett. 1980, Vol. 36 №4, pp. 295-297.
3. Stern F., Howard W.E. Properties of semiconductor surface inversion layers in the electric quantum limit // Physical Review. — 1967. — Vol. 163, no. 3. — P. 816.
4. Letartre X., Stievenard D., Barbier E. Analytical calculation of the capacitance associated with a single quantum well located in a junction // Journal of applied physics. — 1991. — Vol. 69, no. 11. — P. 7912–7914.
5. Determination of band offsets in strained $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs quantum wells by capacitance-voltage profiling and Schrödinger-Poisson self-consistent simulation / V.I. Zubkov, M.A. Melnik, A.V. Solomonov et al. // Phys.rev. B. — 2004. — Vol. 70, no. 7. — P. 075312.
6. Brounkov P.N., Benyattou T., Guillot G. Simulation of the capacitance–voltage characteristics of a single-quantum-well structure based on the self-consistent solution of the Schrödinger and Poisson equations // Journal of applied physics. — 1996. — Vol. 80, no. 2. — P. 864–871.
7. Зубков В. И. Диагностика полупроводниковых наногетероструктур методами спектроскопии адмиттанса. — Техномедиа, 2007. — P. 220.
8. Flux periodic magnetoconductance oscillations in GaAs/InAs core/shell nanowires / Önder Gül, N. Demarina, Ch. Blömers et al. // Phys.rev. B. — 2014. — Vol. 89, no. 4. — P. 045417.
9. Bertoni, A., Royo, M., Mahawish, F., Goldoni, G. Electron and hole gas in modulation-doped GaAs/Al $_{1-x}$ Ga $_x$ As radial heterojunctions. Phys. Rev. B 84, 205323 (2011). .
10. Wong, B. M., Léonard, F., Li, Q., Wang, G. T. Nanoscale effects on heterojunction electron gases in GaN/AlGa $_x$ N core/shell nanowires. Nano Lett. 11, 3074 (2011). .

11. P. Pfeffer, W. Zawadzki. Phys. Rev. B 52, R14332 (1995).
12. P. Pfeffer, Phys. Rev. B 55, R7359 (1997).
13. P. Pfeffer, W. Zawadzki. Phys. Rev. B, 59, R5312 (1999).
14. P. Pfeffer. Effect of inversion symmetry on the conduction subbands in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs heterostructures. Phys. Rev. B 59, 15902 (1999).
15. P.J. Simmonds, S.N. Holmes, H.E. Beere, and D.A. Ritchie. Spin-orbit coupling in an In_{0.52}Ga_{0.48}As quantum well with two populated subbands. J. Appl. Phys. 103, 124506 (2008).
16. M. Studer, G. Salis, K. Ensslin, D.C. Driscoll, and A.C. Gossard. Gate-Controlled Spin-Orbit Interaction in a Parabolic GaAs/AlGaAs Quantum Well. Phys. Rev. Lett. 103, 027201 (2009).
17. S.S. Krishtopenko, A.V. Ikonnikov, A.V. Maremyanin, K.E. Spirin, V.I. Gavrilenko, Yu.G. Sadofyev, M. Goiran, M. Sadowsky, and Yu.B. Vasilyev. Cyclotron resonance study in InAs/AlSb quantum well heterostructures with two occupied electronic subbands. J. Appl. Phys. 111, 093711 (2012).
18. S. Dietrich, J. Kanter, W. Mayer, S. Vitkalov, D.V. Dmitriev, A.A. Bykov. Quantum electron lifetime in GaAs quantum wells with three populated subbands. Phys. Rev. B 92, 155411 (2015).
19. E. Bernardes, J. Schliemann, M. Lee, J.C. Egues, and D. Loss. Spin-Orbit Interaction in Symmetric Wells with Two Subbands. Phys. Rev. Lett. 99, 076603 (2007).
20. R.S. Calsaverini, E. Bernardes, J.C. Egues, and D. Loss. Intersubband-induced spin-orbit interaction in quantum wells. Phys. Rev. B 78, 155313 (2008).
21. J. Fu and J.C. Egues. Spin-orbit interaction in GaAs wells: From one to two subbands. Phys. Rev. B 91, 075408 (2015).
22. M.I. D'yakonov, V.Yu. Kachorovskii, Sov. Phys. Semicond., 20, 110 (1986).
23. Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры / Н.Н. Леденцов, В.М. Устинов, В.А. Щукин et al. // ФТП. — 1998. — Vol. 32, no. 4. — P. 385–410.
24. Electroabsorption modulator performance predicted from band-edge absorption spectra of bulk, quantum-well, and quantum-well-intermixed InGaAsP structures / Gordon B. Morrison, James W. Raring, Chad S. Wang et al. // Solid-State Electronics. — 2007. — Vol. 51, no. 1. — P. 38 – 47.

25. Электрофизические и структурные свойства двусторонне δ -легированных РНЕМТ-гетероструктур на основе AlGaAs/InGaAs/AlGaAs / И.С. Васильевский, Г.Б. Галиев, Е.А. Климов et al. // ФТП. — 2008. — Vol. 42, no. 9. — P. 1102–1109.
26. Влияние температуры роста спейсерного слоя на подвижность двумерного электронного газа в РНЕМТ-структурах / Г.Б. Галиев, И.С. Васильевский, Е.А. Климов, В.Г. Мокеров, А.А. Черечукин // ФТП, том 40, вып. 12, 2006.
27. Влияние встроенного электрического поля на оптические и электрофизические свойства Р-НЕМТ наногетероструктур AlGaAs/InGaAs/GaAs / Р.А. Хабибуллин, И.С. Васильевский, Г.Б. Галиев, Е.А. Климов, Д.С. Пономарев, В.П. Гладков, В.А. Кульбачинский, А.Н. Клочков, Н.А. Юзеева // ФТП, 2011, том 45, вып. 5.
28. J. Kavalieros, B. Doyle, S. Datta, G. Dewey, M. Doczy, B. Jin, D. Lionberger, M. Metz, W. Rachmady, M. Radosavljevic, U. Shah, N. Zelick, R. Chau, Tri-Gate Transistor Architecture with High-k Gate Dielectrics, Metal Gates and Strain Engineering. Digest of Technical Papers - Symposium on VLSI Technology. 50 - 51. 10.1109 (2006).
29. Влияние параметров поперечного сечения на энергетический спектр в InAs квантовых нитях / В.Е. Дегтярев, С.В. Хазанова, Н.В. Демарина // Тезисы докладов шестнадцатой всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике, 24-28 ноября 2014 г., г. Санкт-Петербург., с. 51.
30. Lieber C.M. Semiconductor nanowires: A platform for nanoscience and nanotechnology // Mrs Bulletin. — 2011. — Vol. 36, no. 12. — P. 1052–1063.
31. Quantum computing based on semiconductor nanowires / S.M. Frolov, S.R. Plissard, S. Nadj-Perge et al. // MRS bulletin. — 2013. — Vol. 38, no. 10. — P. 809–815.
32. A review of MBE grown 0D, 1D and 2D quantum structures in a nanowire / M. De La Mata, X. Zhou, F. Furtmayr et al. // Journal of Materials Chemistry C. — 2013. — Vol. 1, no. 28. — P. 4300–4312.
33. Wernersson, L.-E., Thelander, C., Lind, E., Samuelson, L. III-V Nanowires—extending a narrowing road. IEEE Proceedings 98, 2047 (2010).
34. S.D. Ganichev, E.L. Ivchenko, V.V. Bel'kov, S.A. Tarasenko, M. Sollinger, D. Weiss, W. Wegscheider, W. Prettl. Nature, 417, 153 (2002).

35. J. Sinova, S.O. Valenzuela, J. Wunderlich, C.H. Back, T. Jungwirth. *Rev. Mod. Phys.*, 87, 1213 (2015).
36. M.W. Wu, J.H. Jiang, M.Q. Weng. *Physics Reports*, 493, 61 (2010).
37. Влияние электрического поля на соотношение параметров Рашба и Дрессельхауза в гетероструктурах АПБВ / В.Е. Дегтярев, С.В. Хазанова, А.А. Конаков // *ФТП*, Т. 51, № 11, с. 1462-1467 (2017).
38. Физика низкоразмерных систем / А.Я. Шик, Л.Г. Бакуева, С.Ф. Мусихин, С.А. Рыков. - СПб.: Наука, 2001. - 160с. .
39. Зонная структура полупроводников И.М. Цидильковский, монография, М.: «Наука», 1978, 328 стр.
40. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Курс теоретической физики. - М.: "Наука 1976. Т.V. Статистическая физика. - 584с.
41. Shur M.S. Handbook series on semiconductor parameters. — World Scientific, 1996. — Vol. 1.
42. Ю П., Кардона М. Основы физики полупроводников. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. -560 с.
43. Dingle, R. Quantum states of confined carriers in very thin AlGaAs-GaAs-AlGaAs heterostructures / R. Dingle, W. Wiegmann, C.H. Henry // *Phys. Rev. B* 31 V, 1985, p. 827.
44. Ploog K., Hauser M., Fischer A. Fundamental studies and device application of δ -doping in GaAs Layers and in Al_xGa_{1-x}As/GaAs heterostructures // *Applied Physics A*. — 1988. — Vol. 45, no. 3. — P. 233–244.
45. Управление циркулярной поляризацией электролюминесценции в спиновых светоизлучающих диодах на основе гетероструктур InGaAs/GaAs/ δ {Mn} / Е.И. Малышева, М.В. Дорохин, П.Б. Дёмина et al. // *Физика твердого тела*. — 2017. — Vol. 59, no. 11. — P. 2142–2147.
46. Шик А.Я. Полупроводниковые структуры с delta-слоями // *ФТП*. 1992. №7. с. 1161-1181. .
47. Влияние послеростовой термической обработки на структурные и оптические свойства InP/InAsP/InP нитевидных кристаллов / Г.Э. Цырлин, N. Tchernycheva, G. Patriarche, J.-C. Harmand // *ФТП*, т. 46, вып. 2, 2012.
48. Molecular Beam Epitaxy Growth of GaAs/InAs Core–Shell Nanowires and Fabrication of InAs Nanotubes / T. Rieger, M. Luysberg, T. Schaepers, D. Gruetzmacher, M. Lepsa // *Nano Lett.*, 2012, 12 (11), pp 5559–5564.

49. Lüth, H. Solid Surfaces, Interfaces and Thin Films 2010 (Berlin: Springer).
50. Olsson, L. Ö. et al. Charge accumulation at InAs surfaces. *Phys. Rev. Lett.* 76, 3626 (1996).
51. Padova, P. D. et al. Electron accumulation layer on clean In-terminated InAs(0 0 1)(4×2)-c(8×2) surface. *Surf. Science* 482-485, 587 (2001). .
52. Brudnyi, V. N., Grinyaev, S. N., Kolin, N. G. A model for Fermi-level pinning in semiconductors: radiation defects, interface boundaries. *Physica B* 348, 213 (2003). .
53. Hasegawa, H., Akazawa, M. Surface passivation technology for III–V Semiconductor Nanoelectronics. *Appl. Surface Science* 255, 628 (2008). .
54. Hasegawa, H., Ohno, H. Unified disorder induced gap state model for insulator–semiconductor and metal–semiconductor interfaces. *J. Vac Sci. Technol. B* 4, 1130 (1986).
55. Hasegawa H., Sawada, T. Photoionization and thermal activation of compound semiconductor MOS interfaces and origin of interface states. *J. Vac Sci. Technol.* 21, 457 (1982).
56. Affentauschegg, C., Wieder, H. Properties of InAs/InAlAs heterostructures. *Semicon. Sci. Technol.* 16, 708 (2001).
57. Weber, R., Janotti, A., Van de Walle, C. G. Intrinsic and extrinsic causes of electron accumulation layers on InAs surfaces. *Appl. Phys. Lett.* 97, 192106 (2010). .
58. Dayeh, S. A., Soci, C., Yu, P. K. L., Yu, E. T., Wang, D. Transport properties of InAs nanowire field effect transistors: the effects of surface states. *J. Vac. Sc. Technol. B* 25, 1432 (2007). .
59. Ford, A. C. et al. Diameter-dependent electron mobility of InAs nanowires. *Nano Lett.* 9, 360 (2009). .
60. Scheffler, M., Nadj-Perge, S., Kouwenhoven, L. P., Borgström, M. T., Bakkers, E. P. A. M. Diameter-dependent conductance of InAs nanowires. *J. Appl. Phys.* 106, 124303 (2009).
61. Thelander, C. et al. The electrical and structural properties of n-type InAs nanowires grown from metal–organic precursors. *Nanotechnology* 21, 205703 (2010). .
62. Dayeh, S. A., Yu, E. T., Wang, D. Transport coefficients of InAs nanowires as a function of diameter. *Small* 5, 77 (2009).
63. Wirths, S. et al. Effect of Si-doping on InAs nanowire transport and morphology. *J. Appl. Phys.* 110, 053709 (2011).

64. Sladek, K. et al. Comparison of InAs nanowire conductivity: influence of growth method and structure. *Physica Status Solidi C* 9, 230 (2012).
65. Astromskas, G. et al. Doping incorporation in InAs nanowires characterized by capacitance measurements. *J. Appl. Phys.* 108, 054306 (2010).
66. Blömers, Ch. et al. Electronic phase coherence in InAs nanowires. *Nano Lett.* 11, 3550 (2011). .
67. Blömers, Ch. et al. Gate-induced transition between metal-type and thermally activated transport in self-catalyzed MBE-grown InAs nanowires. *Nanotechnology* 24, 325201 (2013).
68. Heedt, S. et al. Resolving ambiguities in nanowire field-effect transistor characterization. *Nanoscale* 7, 18188 (2015).
69. Dayeh, S. A et al. High electron mobility InAs nanowire field-effect transistors. *Small* 3, 326 (2007).
70. Shu, H., Liang, P., Wang, L., Chen, X., Lu, W. Tailoring electronic properties of InAs nanowires by surface functionalization. *J. Appl. Phys.* 110, 103713 (2011).
71. Khanal, D. R., Yim, J. W. L., Walukiewicz, W., Wu, J. Effects of quantum confinement on the doping limit of semiconductor nanowires. *Nano Lett.* 7, 1186 (2007). .
72. Hang, Q. et al. Role of molecular surface passivation in electrical transport properties of InAs nanowires. *Nano Lett.* 8, 49 (2008). .
73. Timm, R. et al. Interface composition of InAs nanowires with Al₂O₃ and HfO₂ thin films. *Appl. Phys. Lett.* 99, 222907 (2011).
74. Ning, F., Tang, L.-M., Zhang, Y., Chen, K.-Q. First-Principles Study of quantum confinement and surface effects on the electronic properties of InAs nanowires. *J. Appl. Phys.* 114, 224304 (2013).
75. Halpern, E. et al. Measuring surface state density and energy distribution in InAs nanowires. *Phys. Status Solidi A* 211, 473 (2014).
76. Halpern, E., Elias, G., Kretinin, A. V., Shtrikman, H., Rosenwaks, Y. Direct Measurement of surface states density and energy distribution in individual InAs nanowires. *Appl. Phys. Lett.* 100, 262105 (2012).

77. Sladek K.P. Realization of III-V semiconductor nano structures towards more efficient (opto-) electronic devices (Phd. thesis, RTWH Aachen University, 2013).
78. Wentz et. al. Appl. Phys. Lett. 105, 113111 (2014).
79. Фаддеев М.А., Марков К.А. Численные методы. - Нижний Новгород: Издательство Нижегородского госуниверситета, 2005. -156с.
80. R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. Finite volume methods. In P.G. Ciarlet and J.L. Lions, editors, Techniques of Scientific Computing, Part III, Handbook of Numerical Analysis, VII, pages 713–1020. North-Holland, Amsterdam, 2000.
81. Мануилов В.Е. Методы численного моделирования электростатических полей в теории электронных приборов СВЧ. Горький: ГГУ, 1990, 101с.
82. Abou-Elnour, A. and Schunemann, K. A comparison between different numerical methods used to solve Poisson's and Schroedinger's equations in semiconductor heterostructures.// Appl. Phys. V.74 5, 1993, pp. 3273-3276.
83. Моделирование эффективного профиля концентрации в гетероструктурах InGaAs/GaAs с delta-легированными слоями / С.В. Хазанова, В.Е. Дегтярев, С.В. Тихов, Н.В. Байдусь // ФТП. — 2015. — Vol. 49, no. 1. — P. 53–57.
84. A.S. Kozulin, A.I. Malyshev, A.A. Konakov IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series 816 (2017) 012023.
85. Comparison of Iteration Schemes for the Solution of the Multidimensional Schrödinger-Poisson Equations / A. Trellakis, A.T. Galick, A. Pacelli, U. Ravaioli // VLSI Design. — 1998. — Vol. 8, no. 1-4. — P. 105–109.
86. Piprek J. Nitride semiconductor devices: principles and simulation. — John Wiley and Sons, 2007.
87. Measurement of band offset of a strained-layer single quantum well by a capacitance-voltage technique / S. Subramanian, B.M. Arora, A.K. Srivastava et al. // Journal of applied physics. — 1993. — Vol. 74, no. 12. — P. 7618–7620.
88. Spin-dependent tunneling through a symmetric semiconductor barrier / V. I. Perel', S.A. Tarasenko, I.N. Yassievich, S. D. Ganichev, V. V. Bel'kov, W. Prettl // PHYSICAL REVIEW B 67, 201304 (2003).

89. Experimental Separation of Rashba and Dresselhaus Spin Splittings in Semiconductor Quantum Wells / S. D. Ganichev, V.V. Bel'kov, L. E. Golub, E. L. Ivchenko, P. Schneider, S. Giglberger, J. Eroms, J. De Boeck, G. Borghs, W. Wegscheider, D. Weiss, W. Prettl // Phys. Rev. Lett. V. 92, N. 25 (2004).
90. Э. И. Рашба, Свойства полупроводников с петлей экстремумов. I. Циклотронный и комбинированный резонанс в магнитном поле, перпендикулярном плоскости петли. // ФТТ 2, 1224 (1960).
91. F. T. Vas'ko, Spin splitting in the spectrum of two-dimensional electrons due to the surface potential. // JETP Letters 30, 541 (1979). .
92. Yu. A. Bychkov, Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy. / Yu. A. Bychkov, E. I. Rashba // JETP Letters 39, 78 (1984).
93. G. Dresselhaus, Phys. Rev., 100, 580 (1955).
94. Exact SU(2) Symmetry and Persistent Spin Helix in a Spin-Orbit Coupled System Andrei Bernevig B., Orenstein J., and Zhang S.-C. // PRL 97, 236601 (2006).
95. C. Galeriuk p Theory of Semiconductor Nanostructures, Phd (WPI Worcester 2005).
96. В.Л. Зерова, В.В. Капаев, Л.Е. Воробьев, Д.А. Фирсов, S. Schmidt, Е.А. Зибик, А. Seilmeier, E. Towe. ФТП, 38 (12), 1455 (2004).
97. Н.В. Байдусь, П.А. Белевский, А.А. Бирюков, В.В. Вайнберг, М.Н. Винославский, А.В. Иконников, Б.Н. Звонков, А.С. Пилипчук, В.Н. Порошин. ФТП, 44 (11), 1543(2010).
98. Адмиттанс кольцевых диодных структур с квантовыми ямами InGaAs/InAlAs/InP / С.В. Тихов, Н.В. Байдусь, А.А. Бирюков, В.Е. Дегтярев // ФТП. — 2012. — Vol. 46, no. 12. — P. 1561–1565.
99. Моделирование эффективного профиля концентрации в гетероструктурах InGaAs/GaAs с delta-легированными слоями / С.В. Хазанова, В.Е. Дегтярев, С.В. Тихов, Н.В. Байдусь // ФТП. — 2015. — Vol. 49, no. 1. — P. 53–57.
100. M. Hÿtch, C. Gatel, F. Houdellier, E. Snoeck, K. Ishizuka. Microscopy and Analysis, 26 (7), 6(2012).
101. ФТП 2015 49 2, 145.

102. Bastard G. Superlattice band structure in the envelope-function approximation // *Phys.rev. B.* — 1981. — Vol. 24, no. 10. — P. 5693.
103. Stern F. Iteration methods for calculating self-consistent fields in semiconductor inversion layers // *Journal of Computational Physics.* — 1970. — Vol. 6, no. 1. — P. 56–67.
104. Laux S.E. Numerical methods for calculating self-consistent solutions of electron states in narrow channels // *Numerical Analysis of Semiconductor Devices and Integrated Circuits, 1987. NASECODE V. Proceedings of the Fifth International Conference on the Numerical Analysis of Semiconductor Devices and Integrated Circuits, pages=270–275, year=1987, organization=IEEE.*
105. Efficient numerical simulation of electron states in quantum wires / T. Kerkhoven, A.T. Galick, U. Ravaioli et al. // *Journal of applied physics.* — 1990. — Vol. 68, no. 7. — P. 3461–3469.
106. Латеральный транспорт и дальнейшее инфракрасное излучение электронов в гетероструктурах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ с двойными туннельно-связанными квантовыми ямами в сильном электрическом поле / Н.В. Байдусь, П.А. Белевский, А.А. Бирюков et al. // *ФТП.* — 2010. — Vol. 44, no. 11. — P. 1543–1546.
107. Z.S. Gribnikov, K. Hess, G.A. Kosinovsky. *J. Appl. Phys.*, 77 (4), 1337(1995).
108. I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan. *J. Appl. Phys.*, 89, 5815 (2001).
109. Khazanova S.V., Vasilevskiy M.I. Modelling of the composition segregation effect during epitaxial growth of InGaAs quantum well heterostructures // *Semiconductor Science and Technology.* — 2010. — Vol. 25, no. 8. — P. 085008.
110. Туннельно-связанные квантовые ямы $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$: структура, состав и энергетический спектр / С.В. Хазанова, Н.В. Байдусь, Б.Н. Звонков et al. // *ФТП.* — 2012. — Vol. 46, no. 12. — P. 1510.
111. Эффект поля как метод контроля качества гетеронаноструктур на основе $i\text{-InP}$ с двумерным электронным газом / С.В. Тихов, Н.В. Байдусь, А.А. Бирюков et al. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.* — 2012. — no. 12. — P. 19–19.
112. Features of electron gas in InAs nanowires imposed by interplay between nanowire geometry, doping and surface states V.E. Degtyarev, S.V. Khazanova, N.V. Demarina // *Nature: Scientific Reports, volume 7, 2017, 3411.*

113. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Курс теоретической физики: Учеб. пособ.: Для вузов. - М.: Физматлит, 2004. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). - 800с.
114. Blömers, Ch. et al. Hall effect measurements on InAs nanowires. *Appl. Phys. Lett.* 101, 152106 (2012).
115. Demarina, N. V., Lepsa, M. I., Gruetzmacher, D. A. InAs Nanowires with surface states as building blocks for tube-like electrical sensing devices. In *Future Trends in Microelectronics: Frontiers and Innovations*; John Wiley and Sons, Inc., 2013; P. 351.
116. A. Lorke, R.J. Luyken, A.O. Govorov, J.P. Kotthaus, J.M. Garcia, P.M. Petroff Spectroscopy of Nanoscopic Semiconductor Rings, *Phys. Rev. Lett.* 84, 10 ,p. 2223 (2000).
117. S. Yao-ming C. Hang-de, X. Shi-yue Conductance Oscillations through an Aharonov-Bohm Ring with a Quantum Gate, *Journal of Shanghai University*, Vol. 3., No. 3, (1999).
118. S. Datta. *From Atom to transistor*, Cambridge University press, (2005).
119. Theory of the Junctionless Nanowire FET E. Gnani, A. Gnudi, S. Reggiani, G. Baccarani. - *IEEE TRANS ELECTRON DEVICES*. 58. p. 2903-2910 (2011).
120. J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi, T. Enoki. *Phys. Rev. Lett.*, 78, 1335 (1997).
121. B.A. Bernevig, J. Orenstein, S.-C. Zhang. *Phys. Rev. Lett.*, 97, 236601 (2006).
122. M.C. Lüffe, J. Kailasvuori, T.S. Nunner. *Phys. Rev. B*, 84, 075326 (2011).
123. L. Wissinger, U. Rössler, R. Winkler, B. Jusserand, D. Richards. Spin splitting in the electron subband of asymmetric GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum wells: The multiband envelope function approach. *Phys. Rev. B* 58, 15375 (1998).
124. E.O. Kane. Energy band theory. In T.S. Moss, editor, *Handbook on semiconductors*, pp. 193–217. North Holland, Amsterdam, 1982.
125. E. P. Pokatilov, V. A. Fonoberov, V. M. Fomin, and J. T. Devreese, *Phys. Rev. B* 64, 245328.
126. I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan. *J. Appl. Phys.*, 89, 5815 (2001).
127. G. Bastard, “Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures,” Les Editions de Physique, Les Ulis, 1988.
128. B.A. Foreman, *Phys. Rev. B* 56, R12748 (1997).

129. P. Pfeffer, W. Zawadzki. Phys. Rev. B, 59, R5312 (1999).
130. М.И. Дьяконов, В.Ю. Качоровский. ФТП, 20, 178 (1986).
131. Ю.А. Бычков, Э.И. Рашба. Письма в ЖЭТФ, 39, 66 (1984).
132. O. Krebs, P. Voisin. Phys. Rev. Lett., 77, 1829 (1996).
133. Ж.А. Девизорова, В.А. Волков. Письма в ЖЭТФ, 98, 110 (2013).
134. M. Kammermeier, P. Wenk, J. Schliemann. Phys. Rev. Lett., 117, 236801 (2016).
135. M.P. Walser, U. Siegenthaler, V. Lechner, D. Schuh, S.D. Ganichev, W. Wegscheider, G. Salis. Phys. Rev. B, 86, 195309 (2012).
136. A.N. Chantis, Mark van Schilfgaarde and T.Kotani PRL, 96, 086405-1(2006).
137. J. Fu, J.C. Egues. Phys. Rev. B, 91, 075408 (2015).
138. S.V. Khazanova, V.E. Degtyarev, S.V. Tikhov and N.V. Baidus, Semiconductors, 49(1), 50 (2015).
139. A.N. Chantis, M. van Schilfgaarde, T. Kotani Ab Initio Prediction of Conduction Band Spin Splitting in Zinc Blende Semiconductors, PRL 96, 086405 (2006).
140. B.A. Bernevig, J. Orenstein, S.-C. Zhang. Exact SU(2) Symmetry and Persistent Spin Helix in a Spin-Orbit Coupled System. Phys. Rev. Lett. 97, 236601 (2006).
141. G. Engels, J. Lange, Th. Schaeppers and H. Lueth, PRB, 55(4), R1958 (1997).