

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

**Державний заклад
«Південноукраїнський національний педагогічний
університет імені К.Д. Ушинського»**

КУЛИК НАДІЯ ЯРОСЛАВІВНА

УДК 538.971,538.915

**ВПЛИВ НАПРУЖЕНОЇ ГЕТЕРОМЕЖІ НА ЕЛЕКТРОННІ, ДИФУЗІЙНІ ТА
ЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НАНОГЕТЕРОСИСТЕМ**

01.04.07 – фізика твердого тіла

АВТОРЕФЕРАТ

дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Одеса – 2016

Дисертацією є рукопис

Роботу виконано на кафедрі загальної фізики Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка, Міністерство освіти і науки України

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор
Пелещак Роман Михайлович,
Дрогобицький державний педагогічний
університет імені Івана Франка,
завідувач кафедри загальної фізики

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор
Глушко Євген Якович,
Інститут фізики напівпровідників
імені В.Є.Лашкарьова НАН України,
провідний науковий співробітник відділу фотонних
напівпровідникових структур

доктор фізико-математичних наук, професор
Ваксман Юрій Федорович,
Одеський національний університет імені І.І. Мечникова
декан фізичного факультету, директор
навчально-наукового центру медичної і біологічної фізики

Захист відбудеться " __3__ " __березня__ 2016 р. о " __24__ " годині на засіданні спеціалізованої вченої ради К41.053.07 при Південноукраїнському національному педагогічному університеті імені К.Д. Ушинського за адресою: 65000, м. Одеса, вул. Старопортофранківська, 26, Аудиторія 52.

З дисертацією можна ознайомитися у бібліотеці Державного закладу «Південноукраїнського національного педагогічного університету імені К.Д. Ушинського» за адресою: 65000, м. Одеса, вул. Старопортофранківська, 36.

Автореферат розісланий " ____ " січня 2016 року.

Учений секретар
спеціалізованої вченої ради

Тадеуш О.Х.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. З сучасним розвитком нанотехнологій і фізики квантових наносистем виникає питання про вплив якості та геометрії деформованої гетерограниці, форми, розмірів квантових точок (КТ) на квантові стани як вільних, так і зв'язаних носіїв заряду [1*], на дифузійний перерозподіл дефектів між напруженими шарами наногетеросистеми [2*] та на електричні властивості поверхнево-бар'єрних наноструктур з вбудованим шаром квантових точок в область просторового заряду напівпровідника (діоди Шоттки з вбудованим шаром квантових точок) [3*].

Відомо, що електронні характеристики напівпровідникових приладів в значній мірі залежать від властивостей меж поділу між різними матеріалами в гетероструктурах. Наприклад, в гетероструктурах InAs/GaAs (CdTe/ZnTe) з квантовими точками, якість та форма гетеромежі (квантова точка – матриця) визначає транспортні (рухливість, час життя нерівноважних носіїв заряду) характеристики носіїв заряду, оскільки наявність гетеромежі приводить до появи додаткового механізму розсіювання носіїв заряду на шороховатостях поверхні [4*]. Тому результати теоретичних досліджень впливу якості та геометрії деформованої гетеромежі InAs/GaAs на квантові стани носіїв заряду можуть бути використані для проектування нового класу високошвидкісних оптичних перемикачів, надшвидкодійних нанотранзисторів, оптично-реєструючих систем запису інформації та приладів високочастотної наноелектроніки. Знаючи закономірності зміни електронних станів в наноструктурах під впливом неоднорідно-деформованої гетеромежі, можна прогнозовано керувати параметрами цих приладів. Для високочастотної наноелектроніки важливим є дослідження умов виникнення областей з від'ємною диференційною провідністю (ВДП) на ділянках вольт-амперної характеристики у поверхнево-бар'єрних наноструктурах з квантовими точками.

На сьогодні проведено теоретичні дослідження впливу форми поверхні ізольованої квантової точки з потенційною ямою з нескінченно високими стінками на квантові стани носіїв заряду без врахування взаємодії квантової точки з матрицею та деформації матеріалу квантової точки [1*], стаціонарного розподілу дефектів у межах самоузгодженої дифузійно-деформаційної моделі [2*] та ВАХ у гетероструктурах з самоорганізованими КТ [3*].

Нез'ясованими на сьогоднішній день залишаються питання про вплив форми напруженої гетеромежі квантова точка – матриця на квантово-розмірні стани електрона в квантовій точці з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії, про вплив напруженої гетеромежі квантова точка – матриця на кінетику перерозподілу дефектів між напруженими шарами наногетеросистеми (GaAs/InAs/GaAs; ZnTe/CdTe/ZnTe) та питання електричних властивостей поверхнево-бар'єрних наноструктур з вбудованим в область просторового заряду напівпровідника шару напружених квантових точок і критеріїв виникнення S-подібних нестабільностей у вітках ВАХ діода Шоттки з вбудованим шаром квантових точок.

Тому теоретичні дослідження впливу неоднорідно-деформованої гетеромежі з врахуванням самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку на електронні стани

в квантовій точці, на просторово-часовий перерозподіл дефектів у напружених наногетеросистемах GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs (ZnTe/Zn_{1-x}Cd_xTe/ZnTe) та дослідження електричних властивостей діодів Шотткі з вбудованим шаром квантових точок в область просторового заряду напівпровідника є актуальними, як з наукової, так і з практичної сторін в плані створення нового покоління діодів Шотткі.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота відповідає основним напрямкам наукової діяльності Інституту фізики, математики, економіки та інноваційних технологій Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка. Основні результати отримані в рамках виконання наступних тем:

1. “Формування електронно-діркових переходів у напружених гетеросистемах з самоорганізованими дефектно-деформаційними кластерами” (2008–2010 рр., № ДР 0108U000587);

2. “Теорія струмопереносу через бар'єр Шотткі на основі напружених наногетеросистем арсенід індію – арсенід галію з квантовими точками” (2011–2013рр., № ДР: 0111U001019).

Мета і завдання дослідження. Метою роботи є з'ясування впливу неоднорідно-деформованої гетеромежі InAs/GaAs з врахуванням самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку на електронні стани в квантовій точці (InAs), просторово-часовий перерозподіл дефектів у тришаровій напруженій наногетеросистемі GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs та впливу квантових точок, розміщених в області просторового заряду напівпровідника на електричні властивості поверхнево-бар'єрної структури метал – n-GaAs: InAs – n⁺-GaAs.

Для досягнення поставленої мети необхідно розв'язати наступні завдання:

– розрахувати профіль квантуючого потенціалу та енергетичний спектр електрона в наногетеросистемі з квантовими точками з врахуванням самоузгодженої електрон-деформаційної взаємодії;

– теоретично дослідити вплив неоднорідно-деформованої гетеромежі квантова точка – матриця на квантові стани зарядів, які локалізовані в квантовій точці;

– розвинути теорію просторово-часового розподілу точкових дефектів у тришарових наногетеросистемах GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs з напруженими гетерограницями в межах самоузгодженої деформаційно-дифузійної моделі;

– дослідити топологію розподілу електростатичного потенціалу в бар'єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром квантових точок в область просторового заряду напівпровідника;

– розрахувати вольт-амперну характеристику (ВАХ) поверхнево-бар'єрної структури виду Шотткі з вбудованим шаром квантових точок в межах дрейфово-деформаційно-дифузійного наближення з врахуванням самоузгоджених граничних умов.

Об'єктом досліджень є напівпровідникові квантові структури InAs/GaAs з напруженими квантовими точками InAs, напружені тришарові гетеросистеми GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs із точковими дефектами, поверхнево-бар'єрні структури виду Шотткі: метал – n-GaAs: InAs – n⁺-GaAs.

Предметом дослідження є квантово-розмірні стани електрона в напруженій наногетеросистемі InAs/GaAs з неоднорідно-деформованою гетеромежею квантова

точка – матриця, просторово-часовий перерозподіл точкових дефектів у напружених наногетеросистемах GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs, вольт-амперна характеристика (ВАХ) поверхнево-бар'єрної структури виду Шоттки з вбудованим шаром квантових точок в область просторового заряду напівпровідника.

Методи дослідження. У дисертації застосовано такі методи: метод самоузгодженого електрон-деформаційного потенціалу, метод теорії збурення форми поверхні квантової точки, метод функції Гріна, метод самоузгодженого дифузійно-деформаційного зв'язку, метод послідовних надрелаксацій, метод самоузгоджених граничних умов.

Наукова новизна одержаних результатів. У рамках дисертаційного дослідження **вперше** отримано такі нові результати:

1. Розвинуто метод розрахунку квантових станів зарядів, які локалізовані в квантовій точці з врахуванням як самоузгодженої електрон-деформаційної взаємодії, так і неоднорідно-деформованої гетеромежі квантова точка – матриця.

2. Показано, що самоузгоджений електрон-деформаційний потенціал напруженої наногетеросистеми з квантовими точками приводить до формування додаткових квазітрикутних потенціальних ям в квантовій точці і квазітрикутних потенціальних бар'єрів в матриці та до пониження енергії основного та збудженого станів електрона в квантовій точці.

3. Встановлено, що аксіально-симетричне збурення сферичної форми квантової точки InAs і деформація її матеріалу приводять до перерозподілу густини ймовірності локалізації електрона в квантовій точці, а електрон-деформаційна взаємодія квантової точки з матрицею InAs/GaAs приводить до зменшення ймовірності локалізації електрона в квантовій точці.

4. Показано, що самоузгоджений дифузійно-деформаційний перерозподіл точкових дефектів виду центрів стиску (розтягу), зумовлений градієнтом концентрації точкових дефектів та градієнтом деформації, що викликана як точковими дефектами, так і напруженими гетеромежами GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs, приводить до зменшення (збільшення) їх концентрації в робочій області In_xGa_{1-x}As структури GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs.

5. Встановлено, що вольт-амперна характеристика (ВАХ) низькобар'єрного ($\Delta \leq 0.5\text{eV}$) діода Шоттки (метал – n-GaAs: InAs – n⁺-GaAs) з вбудованим шаром квантових точок в область просторового заряду напівпровідника має S-подібний характер за умови, коли шар квантових точок знаходиться на відстанях L_d від межі контакту метал – напівпровідник порядку $10a_0$ (a_0 – період ґратки напівпровідника), тоді як із збільшенням висоти бар'єру Δ від 0.5eV до 0.9eV, так і відстані від металу до шару квантових точок ($L_d > 10a_0$) S-подібний характер ВАХ зникає.

Практичне значення одержаних результатів. Результати теоретичних досліджень впливу деформації та геометрії гетеромежі InAs/GaAs на квантові стани носіїв заряду та електричні властивості діодів Шоттки з вбудованим шаром квантових точок в область просторового заряду напівпровідника можуть бути безпосередньо використані для проектування та створення низькобар'єрних діодів як детекторів мікрохвильового випромінювання без постійного робочого зміщення, нового класу високочастотних генераторів і для методу електронної спектроскопії енергетичних рівнів у системах низької розмірності. Дослідження впливу

напружених гетеромеж на просторовий розподіл точкових дефектів може бути використане для експериментального методу очищення дефектів з епітаксійних шарів способом деформаційної дії.

Особистий внесок здобувача. У всіх наукових працях опублікованих у співавторстві, дисертантка брала участь у постановці та обґрунтуванні задач, у проведенні числових розрахунків, оформленні наукових публікацій та комп'ютерній обробці результатів.

У роботах [1,5] дисертанткою проведено розрахунок квантово-розмірних станів електрона в напруженій наногетеросистемі InAs/GaAs з неоднорідно-деформованою гетеромежею квантова точка – матриця. У роботах [3,4] розраховано просторово-часовий розподіл точкових дефектів у тришарових наногетеросистемах GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs з врахуванням самоузгодженої деформаційно-дифузійної взаємодії та вольт-амперну характеристику поверхнево-бар'єрної структури виду Шотткі з вбудованим шаром квантових точок з врахуванням самоузгоджених граничних умов.

Усі результати, що виносяться на захист та висновки дисертації належать дисертантці.

Апробація результатів дисертації. Матеріали дисертаційної роботи були представлені на міжнародних наукових конференціях: XIV Международной научно-практической конференции “Современные информационные и электронные технологии” (Одесса, 2013); VIII Міжнародній школі-конференції “Актуальні проблеми фізики напівпровідників” (Дрогобич, 2013); I Міжнародній науково-практичній конференції молодих вчених “Розвиток сучасної освіти і науки: результати, проблеми, перспективи” (Дрогобич, 2013); XII-th International Conference “Modern Problems of Radio Engineering, Telecommunications and Computer Science”(TCSET'2014) (Lviv-Slavske, Ukraine, 2014); VI Міжнародній науково-технічній конференції “Сенсорна електроніка та мікросистемні технології” (СЭМСТ-6) (Одеса, 2014); XVI Международной научно-практической конференции “Современные информационные и электронные технологии” (Одесса, 2015).

Публікації. Результати дисертаційної роботи опубліковані в 12 роботах, з них: 7 статей [1-7] у провідних вітчизняних та міжнародних наукових журналах, 4 роботи [8-11] в матеріалах міжнародних конференцій, 1 робота [12] – у друкованих тезах наукової міжнародної конференції.

Структура дисертації. Дисертаційна робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків та списку використаних джерел, що складається із 112 найменувань. Повний обсяг роботи становить 128 сторінок друкованого тексту, що містить 27 рисунків.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи, сформульовано мету й завдання дослідження, визначено об'єкт, предмет і методи дослідження, викладено наукову новизну та практичне значення одержаних результатів, подано інформацію про особистий внесок автора, апробацію наукових результатів, кількість публікацій та структуру дисертації.

У **першому розділі** дисертації приведено огляд літератури присвячений дослідженню впливу деформованої гетеромежі, форми, розмірів квантових точок на квантові стани носіїв заряду, деформаційно-дифузійного перерозподілу дефектів в напівпровідникових гетероструктурах та ВАХ в багатошарових гетероструктурах з квантовими точками.

Представлений огляд літератури показав, що на сьогоднішній день нерозв'язаними залишаються задачі про вплив форми напруженої гетеромежі квантова точка – матриця на квантово-розмірні стани електрона в квантовій точці з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії, про кінетику перерозподілу дефектів між напруженими шарами наногетеросистеми (GaAs/InAs/GaAs; ZnTe/CdTe/ZnTe) в межах самоузгодженого дифузійно-деформаційного зв'язку. Нез'ясованими залишаються також питання електричних властивостей поверхнево-бар'єрних структур виду Шоттки (метал–GaAs:InAs (КТ)) з вбудованим шаром напружених квантових точок в область просторового заряду напівпровідника та критеріїв виникнення S-подібних нестабільностей у вітках ВАХ діода Шоттки з вбудованим шаром квантових точок.

Другий розділ дисертації присвячений дослідженню впливу як самоузгодженого електрон-деформаційного потенціалу сферичної квантової точки, взаємодіючої з матрицею, так і неоднорідно-деформованої гетеромежі квантова точка – матриця (InAs/GaAs) на квантово-механічні стани зарядів, локалізованих всередині деформованої квантової точки.

Квантово-механічні стани зарядів, локалізованих всередині деформованої квантової точки, яка взаємодіє з матрицею знаходяться з розв'язку стаціонарного рівняння Шредінгера

$$i = \begin{cases} 1 \equiv \text{InAs}, & 0 \leq r \leq R_0 \\ 2 \equiv \text{GaAs}, & R_0 \leq r \leq R_1 \end{cases} \quad (1)$$

де R_0 – радіус квантової точки, R_1 – радіус матриці, $m^{*(i)}$ – ефективна маса електрона в квантовій точці ($i=1$) та оточуючій матриці ($i=2$), E_n – енергія електрона на n -рівні в квантовій ямі, $\Delta V_c(r)$ – потенціальна енергія електрона в напруженій наногетеросистемі з квантовими точками із врахуванням механічної $\epsilon_{mech}^{(i)}(r)$, електронної $\epsilon_{el-def}^{(i)}(r)$ складових електрон-деформаційного потенціалу та енергії електростатичної взаємодії зарядів $-e\phi^{(i)}(r)$ на межі квантова точка – матриця описується співвідношенням:

$$\Delta V_c(r) = \Delta E_c(0) + a_c^{(2)}(\epsilon_{mech}^{(2)}(r) + \epsilon_{el-def}^{(2)}(r)) - a_c^{(1)}(\epsilon_{mech}^{(1)}(r) + \epsilon_{el-def}^{(1)}(r)) - e(\phi^{(2)}(r) - \phi^{(1)}(r)),$$

(2)

де $\Delta E_c(0)$ – глибина потенціальної ями для електрона в квантовій точці InAs в недеформованій гетероструктурі InAs/GaAs, $a_c^{(1)}$, $a_c^{(2)}$ – гідростатичні константи деформаційного потенціалу зони провідності в матеріалі квантової точки і матриці.

Параметр деформації i -того матеріалу наногетероструктури $\epsilon^{(i)}(r) = Sp\epsilon_{mech}^{(i)}(r) + Sp\epsilon_{el-def}^{(i)}(r)$ визначається через зміщення атомів $u_r^{(i)}$, які знаходяться з рівняння механічної рівноваги:

$$\frac{d^2 u_r^{(i)}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{du_r^{(i)}}{dr} - \frac{2}{r^2} u_r^{(i)} = D^{(i)} e \frac{d\phi^{(i)}(r)}{dr}, \quad (3)$$

з граничними умовами:

$$\begin{cases} 4\pi R_0^2 \left(u_r^{(2)}|_{r=R_0} - u_r^{(1)}|_{r=R_0} \right) = \Delta V, \\ \sigma_{rr}^{(1)}|_{r=R_0} = \sigma_{rr}^{(2)}|_{r=R_0} - P_L, \\ \sigma_{rr}^{(2)}|_{r=R_1} = -\sigma_{ef}^{(2)}(N-1), \end{cases} \quad P_L = \frac{2\alpha}{R_0}, \quad (4)$$

де $u_r^{(i)}$ – радіальна компонента зміщення атомів в i -му напівпровідниковому матеріалі, $D^{(i)} = \frac{(1+\nu^{(i)})(1-2\nu^{(i)})}{(a^{(i)})^3 E^{(i)}(1-\nu^{(i)})}$, $a^{(i)}$ – параметр ґратки i -го матеріалу наногетероструктури, $\nu^{(i)}$ – коефіцієнт Пуассона, $E^{(i)}$ – модуль Юнга, $\Delta V = f 4\pi R_0^3$, $f = \frac{a^{(1)} - a^{(2)}}{a^{(2)}} \approx 7\%$ – параметр невідповідності ґраток контактуючих матеріалів

InAs/GaAs, P_L – лапласівський тиск, $\alpha = \frac{2 \int_0^{R_1} \rho^{(i)} (c^{(i)})^2 (\epsilon^{(i)})^2 (r) r^2 dr}{R_0 u_r^{(1)}(R_0)}$ – міжфазна вільна

енергія між матеріалом квантової точки InAs та матриці GaAs, $c^{(i)}$ – поздовжня швидкість звуку в i -тому середовищі, $\rho^{(i)}$ – густина i -того середовища, $\sigma_{rr}^{(i)}$ – радіальні складові тензора механічного напруження i -го матеріалу.

Загальний розв'язок неоднорідного рівняння (3) представляється у вигляді суми механічної та електрон-деформаційної складових зміщень:

$$u_r^{(i)}(r) = C_1^{(i)} r + \frac{C_2^{(i)}}{r^2} + \frac{D^{(i)} e}{r^2} \int r'^2 \phi^{(i)}(r') dr', \quad (5)$$

Розподіл електростатичного потенціалу в квантовій точці та матриці знайдений з розв'язку рівняння Пуассона:

$$\Delta \phi^{(i)}(\vec{r}) = \frac{e}{\epsilon_d^{(i)} \epsilon_0} \Delta n^{(i)}(\vec{r}), \quad (6)$$

де $\epsilon_d^{(i)}$ – відносна діелектрична проникність i -того матеріалу наногетеросистеми, ϵ_0 – діелектрична стала, $\Delta n^{(i)}(r) = (n^{(i)}(r) - n_0)$ – зміна електронної густини в околі гетеромежі квантова точка – матриця, яка визначається через суперпозицію добутку хвильових функцій, які знаходяться з рівняння Шредінґера (1)

$$n^{(i)}(\vec{r}) = \sum_n \frac{\Psi_n^{*(i)}(r)\Psi_n^{(i)}(r)}{\exp\left(\frac{E_n - \mu}{kT}\right) + 1}, \quad (7)$$

n_0 – середня концентрація електронів провідності, μ – хімічний потенціал наногетероструктури, який визначається з рівняння:

$$\frac{1}{\Omega_0} \int n(\vec{r}) d\vec{r} = n_0, \quad (8)$$

де Ω_0 – об'єм елементарної комірки.

На рис.1 зображено профіль квантуючого потенціалу для електронів у наногетеросистемі InAs/GaAs з квантовими точками InAs при різних значеннях концентрації електронів провідності ($n_0 = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $n_0 = 10^{18} \text{ см}^{-3}$) у матриці GaAs.

Як видно з рис.1 електрон-деформаційна складова деформаційного потенціалу $\varepsilon_{el-def}^{(i)}(r)$ та електростатична енергія $-e\varphi^{(i)}(r)$ зумовлюють енергетичне зміщення країв дозволених зон $\Delta E_c^{(i)} = a_c^{(i)}\varepsilon^{(i)} - e\varphi^{(i)}(r)$.

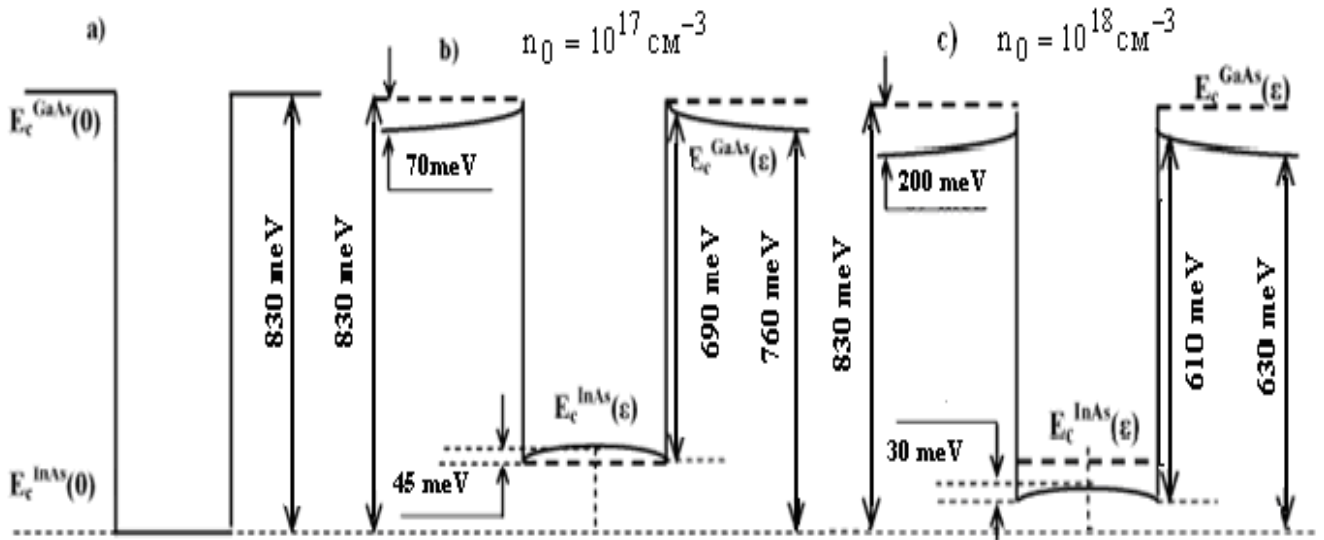


Рис.1. Профіль квантуючого потенціалу наногетеросистеми InAs/GaAs з квантовою точкою InAs радіусом $R_0 = 100 \text{ \AA}$, що формується: за рахунок розриву зон провідності $\Delta E_c(0)$ (a); за рахунок розриву зон провідності $\Delta E_c(0)$ та механічної складової деформаційного потенціалу (b, c пунктирна лінія); за рахунок розриву зон провідності $\Delta E_c(0)$, механічної, електрон-деформаційної складових деформаційного потенціалу та внеску електростатичної енергії (b, c суцільна лінія).

При концентрації електронів провідності $n_0 = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ відбувається неоднорідне енергетичне зміщення (“випучування”) дна квантової ями в сторону більших енергій відносно деформованого дна зони провідності, зумовленого механічною деформацією матеріалу квантової точки $\sim 45 \text{ meV}$ та країв дозволених зон матриці в сторону менших енергій $\sim 70 \text{ meV}$. Із збільшенням середньої концентрації електронів провідності на порядок ($n_0 = 10^{18} \text{ см}^{-3}$) електрон-деформаційна складова деформації приводить до енергетичного пониження країв дозволених зон матриці на 130 meV (рис.1c).

На рис.2 приведено результати числових розрахунків залежностей енергії

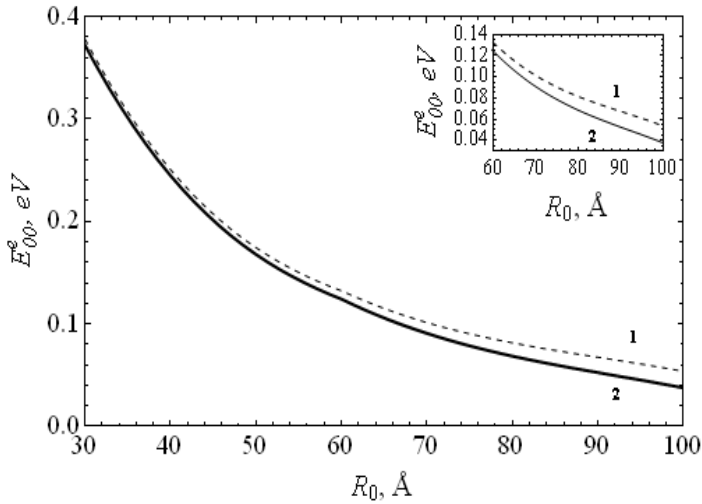


Рис.2. Залежність енергії основного стану елетрона E_{00}^e

від розміру квантової точки InAs ($n_0 = 10^{17} \text{ см}^{-3}$):

- 1– з врахуванням механічної складової електрон-деформаційного потенціалу;
- 2– з врахуванням електрон-деформаційного та електростатичного потенціалів.

електрона в основному стані E_{00}^e від розміру R_0 квантової точки InAs.

Як видно (рис.2), електрон-деформаційна складова деформаційного потенціалу $\varepsilon_{el-def}^{(i)}(r)$ та електростатична енергія $-e\varphi^{(i)}(r)$ приводять до монотонного пониження енергії основного стану електрона (крива 2) відносно енергії основного стану електрона розрахованого з врахуванням механічної складової електрон-деформаційного потенціалу $\varepsilon_{mech}^{(i)}(r)$ (крива 1). Зокрема, пониження енергії основного стану електрона більш проявляється в діапазоні розмірів квантової точки $60 \text{ Å} \leq R_0 \leq 100 \text{ Å}$ (8меВ – 16 меВ).

Дослідження впливу неоднорідно-деформованої

гетеромежі квантова точка –матриця, зумовленого як зміною геометрії сферичної квантової точки, так і деформаційним потенціалом квантової точки на енергетичний спектр електронів і хвильові функції у напруженій гетеросистемі InAs/GaAs з аксіально-симетричним збуренням форми сферичної квантової точки (рис.3) проведене на основі функціонального методу збурення форми поверхні наноб'єкта .

Збурення форми сферичного наноб'єкта з врахуванням неоднорідно-деформованої гетерограниці описується рівнянням

$$\tilde{R}(\theta) = R_0 \sqrt{1 + p^2 \cos^\gamma(k\theta)} + u_r^{(1)}(R(\theta), \theta), \quad (9)$$

де γ, k, p – параметри, від значень яких залежить величина і вид варіації сферичної форми, θ – кут між радіусом-вектором, наведеним з початку координат до точки на поверхні і віссю Z (рис.3), $u_r^{(1)}(R(\theta), \theta)$ – радіальна компонента вектора зміщення атомів.

Спектр енергії квазічастинки в деформованій потенціальній ямі з аксіально-симетричним збуренням форми сферичної квантової точки визначався із

$$E_{nlm}(\varepsilon^{(1)}(R_0, \theta), \varepsilon^{(2)}(R_0, \theta)) \approx E_{nl}^0(\varepsilon^{(1)}(R_0), \varepsilon^{(2)}(R_0)) \left[1 - \frac{\delta \tilde{R}^2(\varepsilon^{(1)}(R_0, \theta))}{R_0^2} \right], \quad (10)$$

де $\delta \tilde{R}^2(\varepsilon^{(1)}(R_0, \theta)) = \tilde{R}^2(\theta) - R_0^2$; ; $E_{nl}^0(\varepsilon^{(1)}(R_0), \varepsilon^{(2)}(R_0))$ – спектр енергії квазічастинки в деформованій квантовій точці з незбуреною поверхнею знаходився з розв'язку рівняння Шредінгера сумісно з рівнянням механічної рівноваги

$$(11)$$

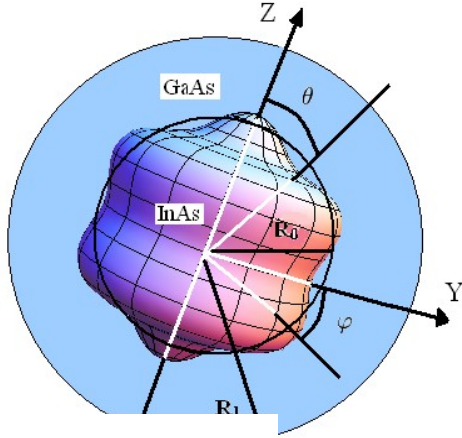


Рис. 3. Геометрична модель неоднорідно-деформованої напруженої поверхнею з використанням функцій Гріна гетеромежі квантова точка- матриця

потенціальною енергією квазічастинки

$$\hat{U}_{(e)}(r) = \begin{cases} 0, & 0 \leq r \leq R_0, \\ \Delta E_c(0) - |a_c^{(1)} \epsilon^{(1)}(r)| - |a_c^{(2)} \epsilon^{(2)}(r)|, & R_0 \leq r \leq R_1, \end{cases} \quad (12)$$

$$\nabla \operatorname{div} u = 0. \quad (13)$$

Хвильові функції електрона у напруженій наногетеросистемі із збуреною поверхнею квантової точки знаходяться як поправки першого порядку малості до хвильових функцій в квантовій точці та матриці із незбуреною

$$\begin{aligned} \psi_{nlm}^1(r, \theta, \varphi) = & \chi_1 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left\{ \int_0^r G_1(r, \rho, \theta, \varphi, \theta_1, \varphi_1) + \int_r^{R(\theta)} G_1(r, \rho, \theta, \varphi, \theta_1, \varphi_1) \right\} \times \\ & \times \psi_{nl}^{0(1)}(\rho, \theta_1, \varphi_1) \rho^2 \sin \theta_1 d\rho d\theta_1 d\varphi_1 + \chi_2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left\{ \int_{R(\theta)}^r G_2(r, \rho, \theta, \varphi, \theta_1, \varphi_1) + \int_r^{R_1} G_2(r, \rho, \theta, \varphi, \theta_1, \varphi_1) \right\} \times \\ & \times \psi_{nl}^{0(2)}(\rho, \theta_1, \varphi_1) \rho^2 \sin \theta_1 d\rho d\theta_1 d\varphi_1, \quad \psi_{nl}^{0(i)}(r, \theta, \varphi) = \begin{cases} R_{nl}^{(1)}(r) Y_{lm}, & 0 \leq r \leq R_0, \\ R_{nl}^{(2)}(r) Y_{lm}, & R_0 \leq r \leq R_1, \end{cases} \end{aligned} \quad (14)$$

$\chi_i = -\frac{2m^{*(i)} \Delta E_{nlm}^1}{\hbar^2}$, $\Delta E_{nlm}^1 = E_{nlm} - E_{nl}^0(\epsilon^{(1)}(R_0), \epsilon^{(2)}(R_0))$ – поправка першого порядку малості для енергії; $G_1(r, \rho, \theta, \varphi, \theta_1, \varphi_1)$, $G_2(r, \rho, \theta, \varphi, \theta_1, \varphi_1)$ – функції Гріна з початком в центрі сфери для областей всередині і зовні нанооб'єкта [5*].

На рис.4 приведено результати числових розрахунків залежностей енергії електрона в основному і в першому збудженому станах від розміру квантової точки InAs в деформованій потенціальній ямі квантової точки із збуреною сферичною формою.

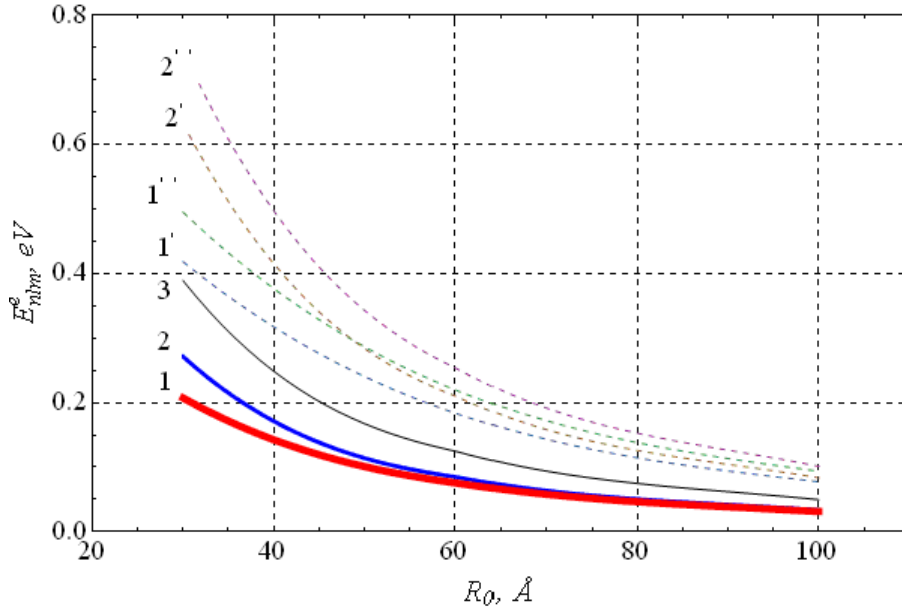


Рис.4. Спектр енергії електрона в квантовій точці:

а) з аксіально-симетричним збуренням її форми: 1, 1' – з врахуванням деформації матеріалу квантової точки в основному E_{100} і в першому збудженому E_{111} станах, відповідно; 2, 2' – без врахування деформації матеріалу квантової точки в основному E'_{100} і в першому збудженому E'_{111} станах, відповідно; **б) без аксіально-симетричного збурення її форми:** 1' – з врахуванням деформації матеріалу квантової точки в першому збудженому стані E_{110} ; 3, 2' – без врахування деформації матеріалу квантової точки в основному E'_{100} і в першому збудженому E'_{110} станах, відповідно.

Із рис.4 видно, що збурення сферичної форми квантової точки, що знаходиться в матриці призводить до зменшення енергії електрона в основному стані E_{100} у неоднорідно-деформованій скінченній потенціальній ямі (крива - 1) відносно енергії E'_{100} у недеформованій скінченній потенціальній ямі (крива - 2) на 132 меВ (10 меВ) при $R_0 = 30\text{Å}$ ($R_0 = 100\text{Å}$).

У **третьому розділі** дисертації побудовано самоузгоджену дифузійно-деформаційну модель нестационарного розподілу точкових дефектів у тришарових напружених наногетеросистемах GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs (ZnTe/Zn_{1-x}Cd_xTe/ZnTe) та розраховано просторово-часовий профіль розподілу точкових дефектів (міжвузлових атомів та вакансій) у тришаровій напруженій наногетеросистемі GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs. Основу цієї моделі складає самоузгоджена система нестационарних рівнянь для параметра деформації $U^{(i)}(z,t)$ та концентрації дефектів $N_d^{(i)}(z,t)$ у напруженій гетеросистемі

$$\frac{1}{(c^{(i)})^2} \frac{\partial^2 U^{(i)}(z,t)}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 U^{(i)}(z,t)}{\partial z^2} - \frac{\theta_d^{(i)}}{\rho^{(i)}(c^{(i)})^2} \frac{\partial^2 N_d^{(i)}(z,t)}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 \epsilon^{(i)}(z)}{\partial z^2}, \quad (15)$$

$\theta_d^{(i)}$ – механічний деформаційний потенціал, $\varepsilon^{(i)}(z) = \begin{cases} \varepsilon_0 \frac{z^2}{a^2}, & i=2, \\ 0, & i=1, 3, \end{cases}$ – механічна

деформація, яка виникає за рахунок неузгодження параметрів ґраток контактуючих матеріалів гетеросистеми, де $i = 1,3$ відповідає зовнішнім шарам GaAs (ZnTe), $i = 2$ – внутрішнім шарам $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$), a – товщина внутрішнього шару, ε_0 – відносна зміна об'єму елементарної комірки внутрішнього шару

$$\frac{\partial N_{dl}^{(i)}(z,t)}{\partial t} = D^{(i)} \frac{\partial^2 N_{dl}^{(i)}(z,t)}{\partial z^2} - D^{(i)} N_{d0}^{(i)} \frac{\theta_d^{(i)}}{kT} \frac{\partial^2 U^{(i)}(z,t)}{\partial z^2} + G_d^{(i)} - \frac{N_{dl}^{(i)}(z,t)}{\tau_d^{(i)}}, \quad (16)$$

$D^{(i)}$ – коефіцієнт дифузії точкових дефектів в i -тому шарі, $G_d^{(i)}$ – швидкість генерації точкових дефектів під впливом механічних коливань, що виникають в процесі формування гетерограниць в напружених наногетероструктурах, $\tau_d^{(i)} \leq 1 \mu\text{с}$ – час життя дефекта в i -тому шарі, $N_{d0}^{(i)}$ – вихідна середня концентрація дефектів в i -тому шарі.

На рис.5 зображено профіль нестационарного розподілу концентрації вакансій (рис.5a) та міжвузлових атомів (рис.5b) у напруженій наногетеросистемі GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs.

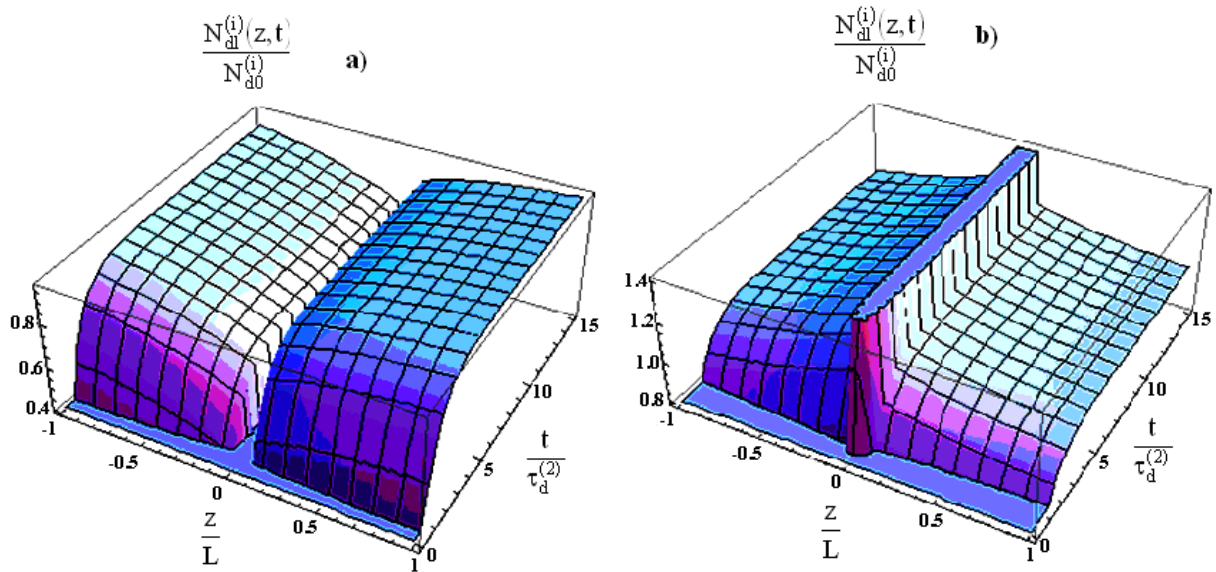


Рис.5. Профіль просторово-часового розподілу концентрації вакансій (a) ($\beta = 10.2$) та міжвузлових атомів (b) ($\beta = -10.2$) у тришаровій напруженій наногетеросистемі з неоднорідно-стиснутим внутрішнім шаром (β – деформаційний параметр, $\frac{N_{d0}^{(1)}}{N_{dc}^{(1)}} = 0.5$;

$$\frac{N_{d0}^{(2)}}{N_{dc}^{(2)}} = 0.8; \frac{N_{d0}^{(3)}}{N_{dc}^{(3)}} = 0.6).$$

Як показує профіль просторово-часового розподілу концентрації дефектів виду центрів стиску (вакансій, рис.5a) або розтягу (міжвузлових атомів, рис.5b), розрахований при різних середніх значеннях концентрації дефектів у шарах ($\frac{N_{d0}^{(1)}}{N_{dc}^{(1)}} = 0.5$; $\frac{N_{d0}^{(2)}}{N_{dc}^{(2)}} = 0.8$; $\frac{N_{d0}^{(3)}}{N_{dc}^{(3)}} = 0.6$), у випадку, коли внутрішній шар зазнає деформації стиску, спостерігається збільшення (зменшення) концентрації міжвузлових атомів (вакансій) у внутрішньому шарі тришарової наногетероструктури.

На рис.6. представлено числові розрахунки перерізу просторово-часового розподілу концентрації вакансій вздовж осі росту гетеросистеми в різні моменти часу $t=0$, $\tau_d^{(2)}$, $5\tau_d^{(2)}$ ($\tau_d^{(2)}$ - середній час знаходження дефекта в одному із положень рівноваги у внутрішньому шарі наногетеросистеми, тобто час осілого життя) .

Як видно із рис.6, на проміжку часу $0 \leq t \leq 5\tau_d^{(2)}$ відбувається просторово-часовий перерозподіл дефектів так, що в неоднорідно-стиснутому внутрішньому шарі їх стає менше відносно вихідного середнього значення $N_{d0}^{(2)}$ на 13,7% (16%) в момент часу $\tau_d^{(2)}$ ($5\tau_d^{(2)}$). Таке зменшення концентрації точкових дефектів виду центрів стиску в напруженій наногетеросистемі GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs зумовлене градієнтом деформації матеріалу внутрішнього шару цієї структури.

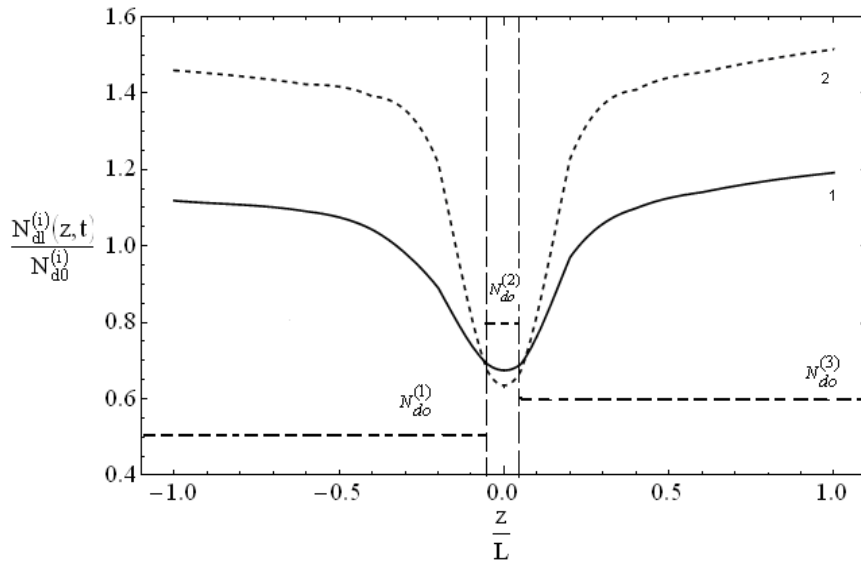


Рис. 6. Переріз просторово-часового розподілу вакансій вздовж осі росту: 1 – в момент часу $t=\tau_d^{(2)}$; 2– $t=5\tau_d^{(2)}$ ($\frac{N_{d0}^{(1)}}{N_{dc}^{(1)}}=0.5$; $\frac{N_{d0}^{(2)}}{N_{dc}^{(2)}}=0.8$; $\frac{N_{d0}^{(3)}}{N_{dc}^{(3)}}=0.6$; $a=0.05L$, L – товщина гетероструктури).

У четвертому розділі дисертації досліджено вплив квантових точок (InAs), розміщених в області просторового заряду напівпровідника, на топологію розподілу потенціалу та характер ВАХ поверхнево-бар'єрної структури метал – n-GaAs: InAs – n⁺-GaAs.

Топологія розподілу двовимірного потенціалу $\varphi(x, y)$ в бар'єрній структурі метал – n-GaAs: InAs – n⁺-GaAs описується розв'язком двовимірного рівняння Пуассона:

$$\frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial y^2} = -\frac{eN_d}{\epsilon_d^{(i)} \epsilon_0} + \frac{eN_{QD}}{\epsilon_d^{(i)} \epsilon_0 L_d} \delta\left(\frac{x}{L_d} - 1\right) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(\frac{y}{h} - 1\right), \quad (17)$$

з крайовими умовами:

$$\begin{aligned} \varphi(0, x) &= \varphi_{BS}, \\ \varphi(L_x, y) &= 0, \\ \varphi(x, 0) &= \varphi_{BS} - \frac{1}{2} \frac{eN_d}{2\epsilon\epsilon_0} x^2, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\varphi(x, L_y) = \varphi_{BS} - \frac{1}{2} \frac{eN_d}{2\epsilon\epsilon_0} x^2,$$

де N_{QD} – поверхнева густина квантових точок, N_d – концентрація донорів, L_d – відстань від металу до шару квантових точок, h – відстань між квантовими точками, φ_{BS} – висота потенціального бар'єру на межі метал – напівпровідник.

На рис.7 представлено числові розрахунки розподілу електростатичного потенціалу в діоді Шотткі з вбудованим шаром квантових точок.

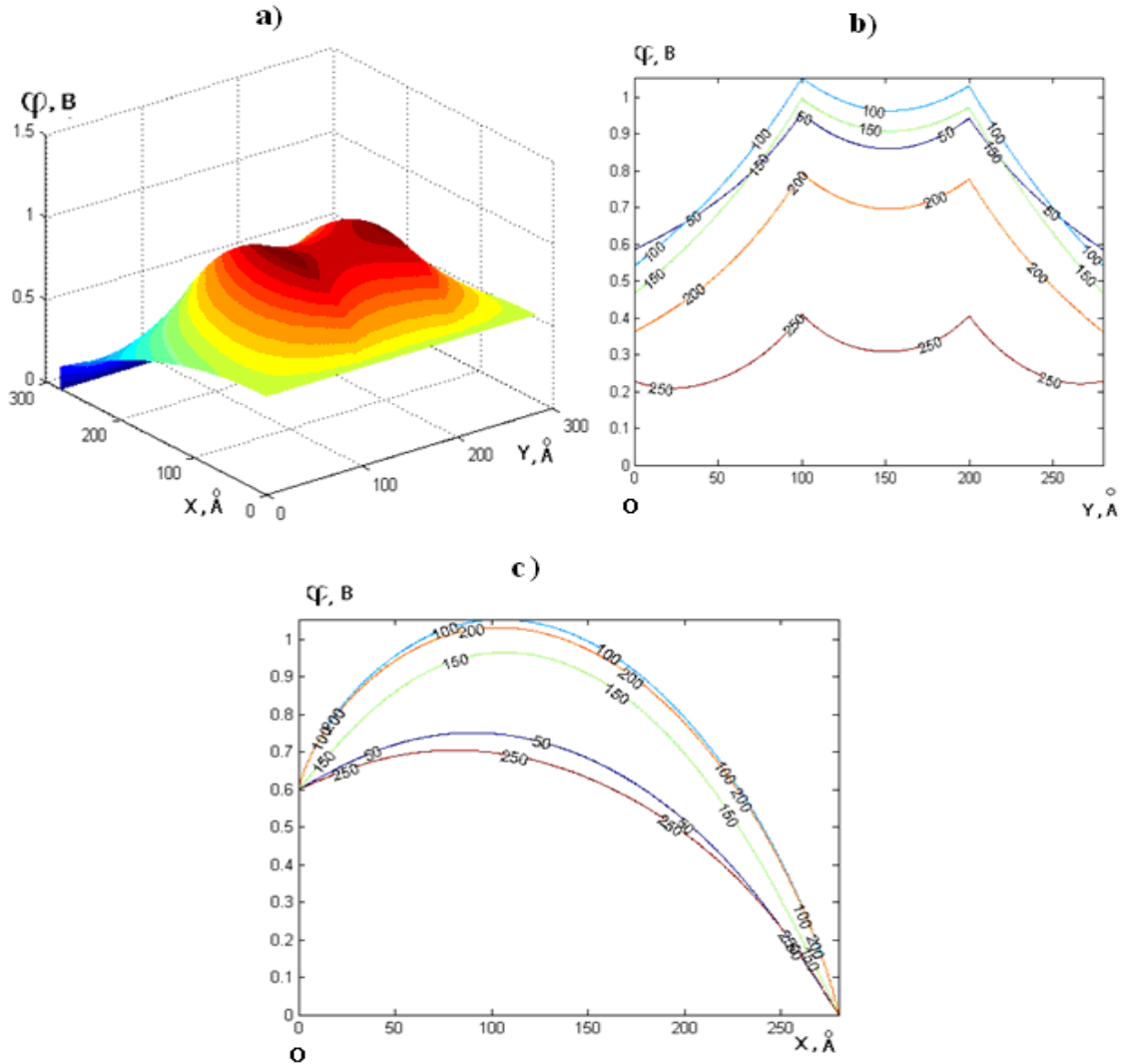


Рис.7. Топологія розподілу електростатичного потенціалу в бар'єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром квантових точок в область просторового заряду (а), координатна залежність розподілу електростатичного потенціалу вздовж напрямку розміщення квантових точок в напрямку ОУ (b) та в напрямку, перпендикулярному до межі контакту метал – легований напівпровідник в напрямку осі ОХ (с): $\varphi_{BS} = 0.6V$, $L_d = 40\text{Å}$, $h = 100\text{Å}$, $R_0 = 30\text{Å}$, $N_d = 10^{18}\text{ см}^{-3}$, $N_{QD} = 3 \cdot 10^{10}\text{ см}^{-2}$.

Як видно з рис.7, потенціал вздовж напрямку розміщення квантових точок (ОУ) має осциляційний характер з періодом h , а в напрямку, перпендикулярному до межі контакту метал – напівпровідник з вбудованим шаром квантових точок, описується немонотонною функцією $\varphi = \varphi(x, y = \text{const})$.

Вольт-амперна характеристика (ВАХ) досліджуваної структури метал – n-GaAs: InAs – n⁺-GaAs описується функціональною залежністю густини струму $\overset{\cup}{j}$ від прикладеної напруги V :

$$V = \frac{kT}{q} \cdot \frac{\epsilon_2}{\epsilon_3} \overset{\cup}{E}_2(\overset{\cup}{L}) + (\chi_0 + \Delta - \Delta_i)/q - \frac{kT}{q} \cdot 2 \ln \left(\frac{Ai(y_1(\overset{\cup}{0})) + C_1 \cdot Bi(y_1(\overset{\cup}{0}))}{Ai(y_1(\overset{\cup}{L_0})) + C_1 \cdot Bi(y_1(\overset{\cup}{L_0}))} \times \right. \\ \left. \times \frac{Ai(y_2(\overset{\cup}{L_0})) + C_2 \cdot Bi(y_2(\overset{\cup}{L_0}))}{Ai(y_2(\overset{\cup}{L})) + C_2 \cdot Bi(y_2(\overset{\cup}{L}))} \right), \quad (19)$$

$y_1(\overset{\cup}{x}) = \left[\frac{\overset{\cup}{j}}{2} \right]^{\frac{1}{3}} \left[\frac{A_1}{j} - \overset{\cup}{x} \right]$, $y_2(\overset{\cup}{x}) = \left[\frac{\overset{\cup}{j}}{2} \right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{A_2}{j} - \overset{\cup}{x} \right]$, A_1 , A_2 , C_1 , C_2 – сталі інтегрування, $\Delta = \Delta_i - q\phi_1(0) - \chi(0)$ – висота потенціального бар'єру на межі напівпровідника з металом, Δ_i – розрив зон провідності на межах контакту легований напівпровідник – квантова точка з врахуванням деформаційного потенціалу $V_{def} = a_c^{(2)}\epsilon^{(2)}$, $\phi_1(0) = \frac{KT}{q} (-2 \ln(Ai(y_1(0)) + C_1 Bi(y_1(0)) + C_1^*))$, $\chi(0) = \chi_0 - qV$, $\chi_0 = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 n_3(x))^{\frac{2}{3}}$, m^* – ефективна маса електрона, q – заряд електрона, $n_3(x)$ – концентрація електронів, ϵ_2 – відносна діелектрична проникливість матеріалу квантової точки, ϵ_3 – відносна діелектрична проникливість n⁺- шару.

Напруженість електричного поля на лівій $\overset{\cup}{E}_1(\overset{\cup}{L_0})$ та правій $\overset{\cup}{E}_2(\overset{\cup}{L})$ гетеромежах контактуючих з шаром квантових точок визначалася із системи трансцендентних рівнянь:

$$\begin{cases} \overset{\cup}{E}_1(\overset{\cup}{L_0}) = \Phi_1(y_2(\overset{\cup}{L_0}), j, \overset{\cup}{E}_1(\overset{\cup}{L_0}), \overset{\cup}{E}_2(\overset{\cup}{L})) \\ \overset{\cup}{E}_2(\overset{\cup}{L}) = \Phi_2(y_2(\overset{\cup}{L}), j, \overset{\cup}{E}_1(\overset{\cup}{L_0}), \overset{\cup}{E}_2(\overset{\cup}{L})) \end{cases} \quad (20)$$

На рис.8 приведено результати числових розрахунків ВАХ для прямого напрямку зміщення для двох значень висоти потенціального бар'єру на межі напівпровідника з металом ($\Delta = 0.5eV$, $0.9eV$) та відстаней від металу до шару квантових точок ($L_d = 50\text{\AA}$, 150\AA).

Як видно із рис.8, ВАХ низькобар'єрного ($\Delta \leq 0.5eV$) діода Шотткі з вбудованим шаром квантових точок в область просторового заряду має S - подібний характер. Із збільшенням висоти бар'єру Δ до $0.9eV$ на ВАХ зникає ділянка (AB) від'ємного диференційного опору і в інтервалі напруг $0.5V-1V$ ВАХ має експоненційний характер. При збільшенні відстані L_d від металу до шару квантових точок від 50\AA - 150\AA зникає струмова бістабільність S-типу (рис.8 b).

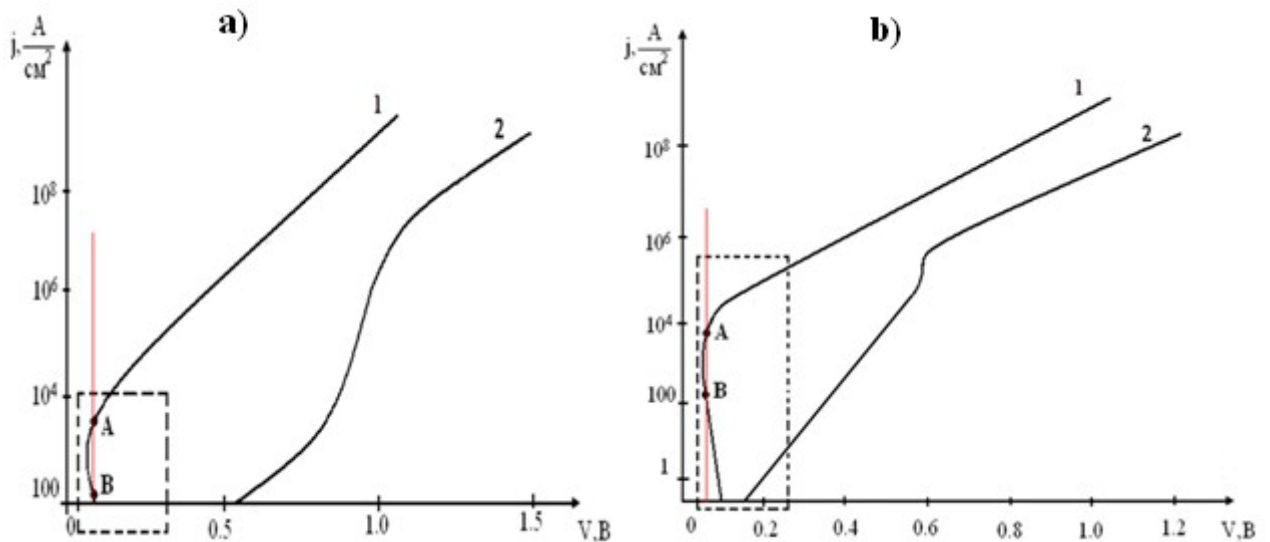


Рис.8. Розрахунок ВАХ для прямого напрямку зміщення при висоті бар'єра Δ (а):
 1 - 0.5eV, 2 - 0.9eV при $T = 300\text{K}$, $L_d = 50\text{\AA}$, $R_0 = 30\text{\AA}$ та для різних L_d (b):
 1 - 50 \AA , 2 - 150 \AA при $R_0 = 30\text{\AA}$, $T = 300\text{K}$, $\Delta = 0.5\text{eV}$.

ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі досліджено вплив неоднорідно-деформованої гетеромежі квантова точка – матриця на квантові стани зарядів, які локалізовані в квантовій точці, на просторово-часовий перерозподіл дефектів у напружених наногетеросистемах GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs та вплив квантових точок на розподіл потенціалу в області просторового заряду напівпровідника і характер ВАХ діода Шоттки (метал – n-GaAs: InAs – n⁺-GaAs).

До найважливіших наукових результатів роботи належать:

1. У межах самоузгодженої електрон-деформаційної моделі досліджено вплив механічної і електрон-деформаційної складових деформаційного потенціалу та енергії електростатичної взаємодії зарядів на межі квантова точка – матриця на характер квантуючого потенціалу в напруженій наногетеросистемі InAs/GaAs з квантовими точками InAs.

2. Показано, що врахування електронної складової самоузгодженого електрон-деформаційного потенціалу та енергії електростатичної взаємодії зарядів на межі квантова точка – матриця приводять до утворення в квантуючому потенціалі додаткових квазітрикутних потенціальних ям в квантовій точці і квазітрикутних бар'єрів в матриці та до пониження енергії основного (збудженого) стану електрона в квантовій точці ($R_0 = 100\text{\AA}$) на 16 меВ (21 меВ).

3. Показано, що енергія електрона в основному і в першому збудженому станах у неоднорідно-деформованій скінченній потенціальній ямі квантової точки з аксіально-симетричним спотворенням її форми є меншою ніж енергія електрона в недеформованій скінченній потенціальній ямі з таким же спотворенням її форми.

4. Встановлено, що аксіально-симетричне збурення сферичної форми квантової точки InAs і деформація її матеріалу приводять до перерозподілу густини ймовірності локалізації електрона в квантовій точці, а електрон-деформаційна взаємодія квантової точки з матрицею InAs/GaAs приводить до зменшення густини ймовірності локалізації електрона.

5. Встановлено, що концентраційний профіль точкових дефектів при $N_{d0}^{(i)} < N_{dc}^{(i)}$ має немонотонний характер з мінімумом всередині внутрішнього шару $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, який збіднюється точковими дефектами виду центрів стиску, коли внутрішній шар гетероструктури GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs зазнає неоднорідного стиску, а у випадку неоднорідного розтягу має місце обернений ефект.

6. За умов, коли відношення вихідних середніх концентрацій точкових дефектів виду центрів стиску $\frac{N_{d0}^{(i)}}{N_{dc}^{(i)}} (i=1,2,3)$ і деформаційний параметр β становлять 0.5, 0.8, 0.6 та 10.2, відповідно, показано: якщо товщина середнього шару $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ наногетеросистеми GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs становить $a=0.05L$, то встановлена концентрація вакансій $\frac{N_{d0}^{(2)}(z, 5\tau^{(2)})}{N_{dc}^{(2)}}$ в цьому шарі є меншою за вихідну середню концентрацію $N_{d0}^{(2)}$ на 16%. Таке зменшення концентрації точкових дефектів виду центрів стиску в напруженій наногетеросистемі GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs зумовлене градієнтом деформації матеріалу внутрішнього шару цієї структури. При цьому індукований неоднорідним деформаційним полем дифузійний потік точкових дефектів виду центрів стиску (розтягу) має напрям протилежний (співпадає) до градієнта деформації матеріалу в середньому шарі гетероструктури.

7. Показано, що вздовж напрямку розміщення квантових точок (OY) в області просторового заряду діода Шотткі потенціал має осцилюючий характер з періодом h , який визначається періодом розміщення квантових точок, а в напрямку, перпендикулярному до межі контакту метал – легований n-типу напівпровідник з шаром квантових точок, описується немонотонною функцією $\Phi = \Phi(x, y = \text{const})$, яка при $\frac{x}{L_d} \approx 1$ асимптотично спадає за експоненціальним законом.

8. В межах дрейфово-деформаційно-дифузійного наближення отримано аналітичний розв'язок задачі про інжекцію носіїв струму в структурі: метал – нелегований напівпровідник з шаром квантових точок (n-GaAs:InAs) – сильно легована підкладка (n^+ -GaAs) та побудована ВАХ цієї структури для різних режимів протікання струму. Показано, що вольт-амперна характеристика (ВАХ) низькобар'єрного ($\Delta \leq 0.5eV$) модифікованого діода Шоткі з вбудованим шаром квантових точок в область просторового заряду має S-подібний характер за умови, коли шар квантових точок знаходиться на відстанях L_d від межі контакту метал – напівпровідник порядку $10a_0$ (a_0 – період ґратки напівпровідника), тоді як із збільшенням висоти бар'єру Δ від $0.5eV$ до $0.9eV$, так і відстані від металу до шару квантових точок ($L_d > 10a_0$) S-подібний характер ВАХ зникає.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1*. Дзюба В.П. Квантово-размерные состояния деформированной наносферы / В.П. Дзюба, Ю.Н. Кульчин, В.А. Миличко // ФТТ. – 2014. – Т. 56, №2. – С.355-361.

2*. Пелешак Р.М. Самоорганизованный диффузионно-деформационный розподіл точкових дефектів у напружених гетеросистемах / Р.М. Пелешак, О.В. Кузик // УФЖ. – 2007. – Т.52, № 7. – С.689-694.

3*. Li H. W. Hysteresis in electronic transport through an ensemble of InAs self-assembled quantum dots / H. W. Li, T. H. Wang // Physica B. – 2001. – V.301, № 3-4. – P.174-179.

4*. Васильев Ю.Б. Влияние качества гетерограниц на спектры циклотронного резонанса гетероструктур InAs/(AlGa)Sb / Ю.Б. Васильев, С.Д. Сучалкин, С.В. Иванов // ФТТ. – 1997. – Т. 31, №10. – С.1246-1248.

5*. Морс Ф.М. Методы теоретической физики / Ф.М. Морс, Г. Фешбах. Т.2. – М.: ИЛ, 1960. – 897с.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Кулик Н.Я. Вплив електрон-деформаційних ефектів на електронну структуру квантових точок у напружених наногетероструктурах / Р.М. Пелешак, Н.Я. Кулик // УФЖ. – 2014. – Т.59, № 11. – С.1099-1107.

2. Кулик Н.Я. Моделювання розподілу потенціалу в бар'єрній структурі Шоттки з вбудованим шаром квантових точок / Р.М. Пелешак, І.І. Лазурчак, М.В. Дорошенко, Н.Я. Кулик // Фізика і Хімія твердого тіла. – 2014. – Т.15, № 4. – С.693-698.

3. Kulyk N.Ya. Spatial-temporal redistribution of point defects in the three-layer stressed nanoheterosystems within the framework of the self-assembled deformation-diffusion model / R.M. Peleshchak, N.Ya. Kulyk, M.V. Doroshenko // Condensed Matter Physics. – 2015. – Т.18, № 2. – С.23602-1–23602-12.

4. Кулик Н.Я. Керування струмопереносом у діодах Шоттки за допомогою квантових точок / Р.М. Пелешак, Н.Я. Кулик, В.Б. Британ // Сенсорна електроніка та мікросистемні технології. – 2015. – Т.12, № 4. – С.60-69.

5. Кулик Н.Я. Вплив неоднорідно-деформованої гетеромежі квантова точка – матриця на квантово-розмірні стани зарядів / Р.М. Пелешак, Н.Я. Кулик // Фізика і Хімія твердого тіла. – 2015. – Т.16, № 4. – С.609-626.

6. Кулик Н.Я. Математичне моделювання просторово-часового розподілу дефектів у тришарових напружених наногетеросистемах / Р.М. Пелешак, М.В. Дорошенко, Н.Я. Кулик [та ін.] // Актуальні проблеми фізики, математики та інформатики. – Дрогобич. – 2013. – №5. – С.56-61.

7. Кулик Н.Я. Вплив неоднорідної деформації границі поділу квантова точка – матриця на квантово-розмірні стани / Н.Я. Кулик, Л.В. Лазурчак, М.В. Забілик // Актуальні проблеми фізики, математики та інформатики. – Дрогобич. – 2014. – №6. – С.7-10.

8. Кулык Н.Я. Моделирование формирования в электрическом поле однородной эпитаксиальной пленки на подложке при рассогласованных параметрах их решеток / Р.М. Пелешак, Н.В. Дорошенко, Н.Я. Кулык, Н.И. Жук // Современные

информационные и электронные технологии: материалы XIV Международной научно-практической конференции, 27-31 мая. –Одесса, 2013.– С.166-167.

9. Kulyk N.Ya. Control Character of Schottky Current Transfer Diode Using Quantum Dots / R.M. Peleshchak, Z. Yu Hotra, I.P, Kremer, N.Ya. Kulyk // Modern Problems of Radio Engineering, Telecommunications and Computer Science (TCSET'2014): proceedings of the International Conference, February 25–March 1.– Lviv-Slavske, 2014. – С.296-298.

10. Кулик Н.Я. Кінетика процесів дифузії в напружених наногетеросистемах GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs (ZnTe/Zn_{1-x}Cd_xTe/ZnTe) у межах самоузгодженої деформаційно-дифузійної моделі / Р.М. Пелешчак, М.В. Дорошенко, Н.Я. Кулик, М.Б. Мацько // Сенсорна електроніка та мікросистемні технології: матеріали VI Міжнародної науково-технічної конференції, 29.09-03.10. – Одеса, 2014. – С.166.

11.Кулык Н.Я. Влияние неоднородной деформации границы раздела квантовая точка-матрица на квантово-размерные состояния заряда / Н.Я. Кулык, Р.М. Пелешчак [та ін.] // Современные информационные и электронные технологии: труды XVI Международной научно-практической конференции, 25-29 мая. – Одеса, 2015. – С.250-251.

12.Кулик Н.Я. Електронна структура КТ у напружених наногетероструктурах під впливом електрон-деформаційної взаємодії / Н.Я. Кулик, Р.М. Пелешчак, О.О. Даньків, О.В. Кузик // Розвиток сучасної освіти і науки: результати, проблеми, перспективи: тези доповідей Міжнародної науково-практичної конференції молодих вчених, 21-22 листопада. – Дрогобич, 2013. – С.294.

АНОТАЦІЇ

Кулик Н.Я. Вплив напруженої гетеромежі на електронні, дифузійні та електричні властивості наногетеросистем. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико математичних наук за спеціальністю 01.04.10 – фізика твердого тіла. Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К.Д. Ушинського, м.Одеса, 2016.

У дисертації теоретично досліджено вплив неоднорідно-деформованої гетеромежі квантова точка – матриця на квантові стани зарядів, які локалізовані в квантовій точці, на просторово-часовий перерозподіл дефектів у напружених наногетеросистемах GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs та електричні властивості поверхнево-бар'єрних структур виду Шотткі з вбудованим шаром напружених квантових точок в область просторового заряду напівпровідника (метал – n-GaAs: InAs – n⁺-GaAs) і критеріїв виникнення S-подібних нестабільностей у вітках ВАХ діода Шотткі з вбудованим шаром квантових точок.

Ключові слова: електрон-деформаційний потенціал, просторово-часовий розподіл, діод Шотткі, вольт-амперна характеристика.

Кулык Н.Я. Влияние напряженной гетерограницы на электронные, диффузионные и электрические свойства наногетеросистем. – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико математических наук по специальности 01.04.10 – физика твердого тела. Южноукраинский национальный педагогический университет имени К.Д. Ушинского, Одесса, 2016.

В диссертации теоретически исследовано влияние неоднородно-деформированной гетерограницы квантовая точка – матрица на квантовые состояния зарядов, локализованных в квантовой точке, на пространственно-временное распределение дефектов в напряженных наногетеросистемах GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs, и также электрические свойства поверхнево-барьерных структур вида Шоттки со встроенным слоем напряженных квантовых точек в область пространственного заряда полупроводника (металл – n-GaAs: InAs – n⁺-GaAs) и критерии возникновения S-образных нестабильности в ветвях ВАХ диода Шоттки с встроенным слоем квантовых точек.

В пределах самосогласованной электрон-деформационной модели построена теория формирования зонного профиля квантуемого потенциала и энергетических уровней в напряженной наногетеросистеме с когерентно напряженными квантовыми точками. Показано, что учет электронной составляющей самосогласованного электрон-деформационного потенциала, энергии электростатического взаимодействия зарядов на пределе квантовая точка – матрица приводят к образованию в квантуемому потенциале дополнительных квазитреугольных потенциальных ям в квантовой точке и квазитреугольных барьеров в матрице и к понижению энергии основного и возбужденного состояний электрона в квантовой точке.

Установлено, что аксиально-симметричное возмущение сферической формы квантовой точки InAs и деформация ее материала приводят к уменьшению энергии электрона в основном и в первом возбужденном состояниях в деформированной потенциальной яме в квантовой точке, перераспределению плотности вероятности локализации электрона в квантовой точке, а электрон-деформационное взаимодействие квантовой точки с матрицей InAs/GaAs приводит к уменьшению вероятности локализации электрона в квантовой точке.

Построена модель пространственно-временного распределения точечных дефектов в трехслойной напряженной наногетеросистеме GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs с учетом самосогласованного деформационно-диффузионного взаимодействия. В пределах этой модели рассчитан профиль пространственно-временного распределения вакансий (межузловых атомов) в напряженной наногетеросистеме GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs и показано, что в случае установления стационарного состояния ($t > 5\tau_d^{(2)}$), концентрация вакансий в неоднородно-сжатому внутреннем слое является меньшей относительно исходного среднего значения $N_{d0}^{(2)}$ на 16%.

Показано, что диффузионно-деформационное перераспределение точечных дефектов вида центров сжатия (растяжения) приводит к уменьшению (увеличению) их концентрации в рабочей области In_xGa_{1-x}As структуры GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs.

Построена математическая модель распределения электростатического потенциала в диоде Шоттки со встроенным слоем квантовых точек. Показано, что вдоль направления размещения квантовых точек (OY) потенциал имеет

осциллирующий характер с периодом \hbar , который определяется характером размещения квантовых точек, а в направлении, перпендикулярном к пределу контакту металл – легированый n-типу полупроводник, описывается немонотонной функцией $\Phi = \Phi(x, y = \text{const})$.

В рамках дрейфово-деформационно-диффузионного приближения с учетом самосогласованных граничных условий установлены критерии на технологические параметры, при которых вольт-амперная характеристика (ВАХ) поверхностно-барьерной структуры вида Шоттки с встроенным слоем квантовых точек имеет S-образный характер.

Показано, что вольт-амперная характеристика (ВАХ) низькобарьерного ($\Delta \leq 0.5\text{eV}$) диода Шоттки (металл – n-GaAs: InAs – n⁺-GaAs) со встроенным слоем квантовых точек в область пространственного заряда полупроводника имеет S-подобный характер за условия, когда слой квантовых точек находится на расстояниях L_d от предела контакта металл – полупроводник порядка $10a_0$ (a_0 – период решетки полупроводника), тогда как с увеличением высоты барьера Δ от 0.5eV к 0.9eV , так и расстояния от металла к слою квантовых точек ($L_d > 10a_0$) S-подобный характер ВАХ исчезает.

Ключевые слова: электрон-деформационный потенциал, пространственно-временное распределение, диод Шоттки, вольт-амперная характеристика.

Kulyk N.Ya. The Influence of stressed heteroboundary on electronic, diffusion and electrical properties nanoheterosystems. – Manuscript.

Dissertation on the receipt of scientific degree of candidate of physics and mathematics sciences after speciality 01.04.07 – physics of the solid state. South Ukrainian National Pedagogical University named after K.D. Ushynsky, Odessa, 2016.

In dissertation the influence inhomogeneously deformed heteroboundary quantum dot – matrix on the quantum states charges localized in a quantum dot, on spatial-temporal redistribution of defects in stressed nanoheterosystem GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs is theoretically investigated. It is found the question of electrical properties of surface-barrier structure of type Schottky with built layer of quantum dots in the area of spatial charge of semiconductor (metal – n-GaAs: InAs – n⁺-GaAs) and criteria appearance of S-shaped instabilities in the branches of CVC of Schottky diode with the built layer of quantum points.

Keywords: electron-deformation potential, spatial-temporal redistribution, Schottky diode, current-voltage characteristic.