

На правах рукописи



Милованова Оксана Александровна

**ВЛИЯНИЕ СОСТАВА И ТОЛЩИН СЛОЕВ  
НА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА  
КВАНТОВО-РАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ  
ZnCdS/ZnSSe, ZnSSe/ZnMgSSe**

01.04.10 – Физика полупроводников

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико–математических наук

Рязань 2010

Работа выполнена на кафедре биомедицинской и полупроводниковой электроники ГОУВПО "Рязанский государственный радиотехнический университет"

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,  
профессор

**Вихров Сергей Павлович**

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
профессор

**Казанский Андрей Георгиевич**

доктор физико-математических наук,  
профессор

**Трубицын Андрей Афанасьевич**

Ведущая организация: Учреждение российской академии наук  
Институт общей и неорганической химии  
им. Н.С. Курнакова, (г. Москва)

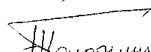
Защита диссертации состоится "9" ноября 2010 года в 11<sup>00</sup> часов на заседании диссертационного совета Д 212.211.03 в ГОУВПО "Рязанский государственный радиотехнический университет" по адресу: 390005, г. Рязань, ул. Гагарина, 59/1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке университета.

Автореферат разослан "29" сентября 2010 года.

Ученый секретарь диссертационного совета,

доктор технических наук, профессор



Б.И. Колотилин

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность

Широкозонные полупроводниковые соединения  $A_2B_6$  занимают особое место в ряду полупроводниковых материалов. За счет изменения соотношения компонентов твердого раствора можно в широком диапазоне изменять его электрофизические и оптические свойства, управлять постоянной решетки, что делает соединения  $A_2B_6$  незаменимыми в целом ряде устройств и приборов, необходимых для применения в гражданской и военной технике.

Для управления шириной запрещенной зоны и согласованием постоянных решетки контактирующих слоев широко применяются трех- и четырехкомпонентные твердые растворы. Подложки из соединений  $A_2B_6$  не производятся в больших количествах или вовсе отсутствуют, поэтому для выращивания квантово-размерных структур используются подложки GaAs или GaP.

Гетероструктуры с квантовыми ямами на основе  $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$  могут использоваться в качестве активной среды лазеров с накачкой электронным пучком, излучающих в синей области спектра. Для лазерных применений не менее интересны гетероструктуры на основе  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_ySe_{1-y}$ . Данная структура потенциально может быть использована для создания лазеров зеленого излучения. Кроме этого, можно подобрать комбинацию составов твердых растворов так, что все слои будут согласованы по постоянной решетки. Такая структура потенциально не имеет внутренних упругих напряжений, которые в лазерах на основе структуры  $ZnCdSe/ZnSe$  являются одним из основных факторов их деградации.

При проектировании полупроводниковых приборов с использованием гетероструктур применяется построение зонных диаграмм. Разрывы разрешенных энергетических зон формируют в переходе потенциальные барьеры разной высоты для носителей заряда. Необходимо знать основные параметры, от которых зависит вид потенциального рельефа для носителей заряда, а именно: ширины запрещенных зон и то, как “стыкуются” запрещенные зоны, какие образуются величины разрывов разрешенных энергетических зон на границе раздела контактирующих между собой слоев, влияние состава, толщины активных слоев квантово-размерных структур на основе соединений  $A_2B_6$  на энергетический спектр носителей заряда, величины разрывов разрешенных энергетических зон, энергию излучательных переходов.

Для целого ряда квантово-размерных структур на основе селенидов, сульфидов цинка, кадмия, магния величины разрывов

разрешенных энергетических зон либо не известны, либо определены недостаточно надежно.

Для расчета величины разрывов разрешенных энергетических зон существуют различные теоретические модели – от модели Андерсона для идеального гетероперехода (называемой также правилом электронного сродства) до более сложных моделей, таких как теория самосогласованного потенциала, теория атомных орбиталей Харрисона и т.д. При практическом применении из-за большой свободы в выборе при расчетах параметров материалов и структур и чувствительности к наличию пограничного диполя на гетерогранице эти теории часто предсказывают величины разрывов разрешенных энергетических зон с большим отличием от величин, измеренных в реальных гетеропереходах. Теория свойств квантово-размерных структур на основе соединений  $A_2B_6$ , их математическое и компьютерное моделирование – это центральное звено в разработке перспективных технологий конструирования, которое позволит проектировать полупроводниковые приборы с заданными свойствами.

В связи с этим представляется актуальным исследование энергетического спектра носителей заряда, величин разрывов разрешенных энергетических зон в квантово-размерных структурах на основе селенидов, сульфидов цинка, кадмия, магния с различной конфигурацией квантово-размерной части, а также моделирование перечисленных характеристик с учетом конфигурации квантово-размерных структур и физических явлений, возникающих при контакте разных материалов и сравнение полученных экспериментальных и теоретических результатов.

**Цель диссертационной работы** – исследование влияния состава и толщин слоев в квантово-размерных структурах на основе гетеропереходов  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_ySe_{1-y}$ ,  $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$  на энергетический спектр носителей заряда, величины разрывов разрешенных энергетических зон, энергии излучательных переходов в квантово-размерных структурах.

**Поставленная цель достигается решением следующих задач:**

- обзор литературных данных по электрическим, оптическим, механическим свойствам квантово-размерных структур на основе селенидов, сульфидов цинка, кадмия;
- анализ существующих моделей расчета величин разрывов разрешенных энергетических зон в гетероструктурах с квантовыми ямами и методов их экспериментального определения;

- моделирование энергетического спектра носителей заряда в квантово-размерных структурах  $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$  и  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_ySe_{1-y}$ ;
- моделирование излучательных переходов в структурах  $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$  и  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_ySe_{1-y}$ ;
- исследование влияния состава и толщин слоев на величины разрывов разрешенных энергетических зон (валентной и зоны проводимости) в квантово-размерных структурах  $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$  и  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_ySe_{1-y}$ , рассчитанных и полученных методами токовой релаксационной спектроскопии глубоких уровней и катодоллюминесценции.

**Основными объектами исследования** были выбраны квантово-размерные структуры с квантовыми ямами  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_ySe_{1-y}$  и  $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$ , выращенные на подложках GaAs(100) методом парофазной эпитаксии из металлорганических соединений и молекулярно-пучковой эпитаксии.

**Научная новизна** представленных в работе результатов заключается в следующем.

1. Развита модель Андерсона, учитывающая влияние упругих напряжений, для моделирования энергетического спектра носителей заряда, хода краев разрешенных зон, энергии излучательных переходов в квантово-размерных структурах с квантовыми ямами, имеющих зонные диаграммы I типа ( $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$ ) и II типа ( $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_ySe_{1-y}$ ) для различных составов твердых растворов и толщин слоев.
2. Впервые экспериментально определена величина разрыва зоны проводимости в гетероструктурах с одиночной квантовой ямой  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_{0,06}Se_{0,94}$ , имеющих зонную диаграмму II типа, который составил 650 мэВ и 373 мэВ при содержании цинка ( $x$ ) в квантовой яме 10 и 40 % соответственно, а также в гетероструктурах с одиночной и множественными квантовыми ямами  $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$ , имеющих зонную диаграмму I типа с различной конфигурацией квантово-размерной части структуры.
3. Разработана новая методика, позволяющая определять концентрацию носителей заряда в прямоугольной квантовой яме в слабелегированных квантово-размерных структурах с зонной диаграммой II типа по величине коротковолнового смещения линии излучения, связанной с квантовой ямой, на спектрах катодоллюминесценции при высоких уровнях накачки электронным пучком.

**Достоверность научных выводов** работы обеспечена использованием независимых методов - токовой релаксационной

спектроскопии глубоких уровней и катодолюминесценции, а также соответствием экспериментальных результатов исследования результатам моделирования энергетического спектра носителей заряда, величин разрывов разрешенных зон, энергий излучательных переходов в квантово-размерных структурах.

#### **Основные научные положения, выносимые на защиту**

1. Рассчитаны величины разрывов разрешенных зон, энергии излучательных переходов в квантово-размерных структурах на основе гетеропереходов  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_ySe_{1-y}$ ,  $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$  с учетом содержания компонентов в твердых растворах и толщины слоев, критической толщины эпитаксиального слоя квантовой ямы.
2. Экспериментально установлено, что величина разрыва зоны проводимости в квантово-размерных структурах с квантовыми ямами на основе  $ZnSe/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$ , выращенных методом эпитаксии из молекулярных пучков, увеличивается от 110 до 220 мэВ с ростом ширины запрещенной зоны твердого раствора  $Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$ , согласованного по постоянной решетки с подложкой GaAs (100), от 3,00 до 3,25 эВ.
3. Обнаружено, что величина разрыва зоны проводимости в квантово-размерных структурах с одиночной квантовой ямой  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_{0.06}Se_{0.94}$ , выращенных методом парофазной эпитаксии из металлоорганических соединений, уменьшается от 650 до 373 мэВ при увеличении содержания цинка ( $x$ ) в квантовой яме от 10 до 40 %.
4. На основе измерений энергии активации носителей заряда методом токовой релаксационной спектроскопии глубоких уровней в структурах  $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$ , выращенных методом эпитаксии из молекулярных пучков на подложках GaAs(100), на границах квантовой ямы обнаружен потенциальный барьер для захвата электронов высотой 56-87 мэВ.

**Практическая значимость результатов работы** заключается в следующем.

1. Рассчитаны величины разрывов разрешенных зон в квантово-размерных структурах с квантовыми ямами  $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$  и  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_{0.06}Se_{0.94}$ , которые позволяют моделировать энергетические зонные диаграммы гетероструктур.
2. Выявлены зависимости разрывов разрешенных зон, энергий излучательных переходов в квантово-размерных структурах с квантовыми ямами  $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$  и  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_ySe_{1-y}$ , которые учитывают конфигурацию квантово-размерной части

структуры и параметры слоев и могут быть использованы при проектировании и расчетах параметров оптоэлектронных приборов.

3. Установлена возможность применения метода токовой релаксационной спектроскопии глубоких уровней для исследования процессов эмиссии и захвата носителей заряда в квантовой яме, а также изучения особенностей потенциального рельефа вблизи квантовой ямы, определения высоты потенциального барьера при его наличии для захвата носителей заряда в квантовой яме без данных о концентрации свободных носителей заряда в барьерных слоях квантово-размерных структур по температурной зависимости произведения концентрации свободных носителей заряда на сечение захвата носителей заряда.

4. Получено соотношение между концентрацией носителей заряда в квантовой яме в слабелегированной квантово-размерной структуре с зонной диаграммой II-типа и величиной сдвига линии излучения от квантовой ямы на спектре катодолюминесценции при увеличении плотности тока накачки электронным пучком, что дает возможность оценить концентрацию носителей заряда в квантовых ямах при высоких плотностях тока накачки.

#### **Апробация**

Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на XII международной конференции «Электромеханика, электротехнологии, электротехнические материалы и компоненты» (г. Алушта, 2008), X и XI международных конференциях «Опто-, наноэлектроника, нанотехнологии и микросистемы» (г. Ульяновск, 2008, 2009,), III международной конференции «Физика электронных материалов – ФИЭМ'08» (г. Калуга; 2008), I и II Всероссийских школах-семинарах студентов, аспирантов и молодых ученых по направлению «Наноинженерия» (г. Москва, г. Калуга; 2008, 2009), II Всероссийской школе-семинаре студентов, аспирантов и молодых ученых по направлению «Наноматериалы» (г. Рязань, 2009), на 14th International Conference on II-VI Compounds (Санкт – Петербург, 2009).

#### **Публикации**

Основные результаты работы достаточно полно отражены в 18 научных работах, из которых 2 статьи (по специальности) в журналах из списка ВАК, 5 статей в других изданиях, 8 тезисов доклада на российских и международных конференциях, 1 учебное пособие и 2 отчета по НИР.

#### **Структура и объем диссертации**

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы из 121 наименования и приложения. Диссертация

изложена на 190 страницах машинописного текста, содержит 22 таблицы и 106 рисунков.

### Внедрение результатов

Полученные экспериментальные результаты использованы при подготовке отчетов по научно-исследовательским работам НИР13–09Г, 26–09; в учебном процессе: в лекционных материалах по дисциплине «Методы исследования материалов и структур электроники».

### ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы, сформулированы цель и задачи диссертации, отражены новизна и практическая значимость работы, представлена структура диссертации.

В **первой главе** представлен обзор литературных данных по электрическим, оптическим, механическим свойствам бинарных соединений ZnS, ZnSe, CdS, CdSe.

Обоснован выбор образцов для исследования: структуры с квантовыми ямами  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_ySe_{1-y}$  и  $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$ , выращенные на подложках GaAs (100) методом парофазной эпитаксии из металлоорганических соединений и молекулярно-пучковой эпитаксии.

Энергетическая диаграмма для структуры  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_ySe_{1-y}$  представлена на рис. 1. Как видно из рисунка, конфигурация зонной диаграммы, когда наблюдается неполное перекрытие запрещенных зон контактирующих материалов, соответствует II типу.

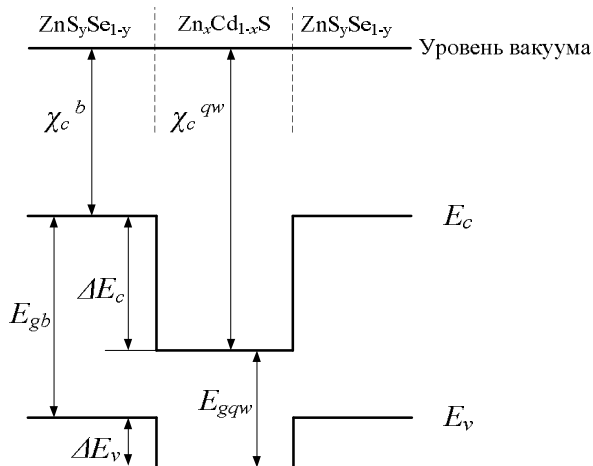


Рис. 1. Энергетическая диаграмма для структуры  $Zn_xCd_{1-x}S / ZnS_ySe_{1-y}$



Наногетероструктура  $\text{ZnS}_x\text{Se}_{1-x}/\text{Zn}_{1-y}\text{Mg}_y\text{S}_z\text{Se}_{1-z}$  имеет конфигурацию зонной диаграммы I типа (рис. 2).

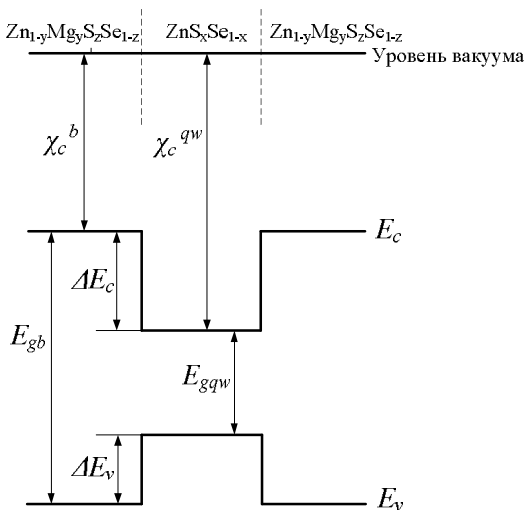


Рис. 2. Энергетическая диаграмма для структуры  $\text{ZnS}_x\text{Se}_{1-x}/\text{Zn}_{1-y}\text{Mg}_y\text{S}_z\text{Se}_{1-z}$

Проведен анализ существующих моделей расчета величин разрывов разрешенных энергетических зон в гетероструктурах с квантовыми ямами. Для расчета величины разрывов разрешенных энергетических зон существуют различные теоретические модели – от модели Андерсона для идеального гетероперехода (называемой также правилом электронного сродства) до более сложных моделей, таких как теория самосогласованного потенциала, теория атомных орбиталей Харрисона и т.д. При практическом применении из-за большой свободы в выборе при расчетах параметров материалов и структур и чувствительности к наличию пограничного диполя на гетерогранице эти теории часто предсказывают величины разрывов разрешенных энергетических зон с большим отличием от величин, измеренных в реальных гетеропереходах. Проведен анализ методов исследования разрывов энергетических зон в квантово-размерных структурах (методы катодолуминесценции, релаксационной спектроскопии глубоких уровней).

Во **второй главе** представлены результаты расчета величин разрывов разрешенных энергетических зон в зависимости от соотношения толщин слоев, различия постоянных решеток,

температурных коэффициентов линейного расширения, составов материалов квантовых ям и барьерных слоев, влияющих на возникновение упругих деформаций слоев. Для расчета величин разрывов разрешенных энергетических зон была выбрана модель, отличающаяся своей простотой и наглядностью, – правило электронного сродства. Согласно правилу электронного сродства разрыв зоны проводимости при контакте двух различных ненапряженных полупроводников равен разности значений сродства к электрону:

$$\Delta E_c(x,y) = \chi_c^{qw}(x) - \chi_c^b(y),$$

где  $\chi_c(x)$  – электронное сродство, индексы “qw” и “b” обозначают то, что соответствующий параметр относится к материалу квантовой ямы или барьерного слоя.

Величины сдвигов краев зоны проводимости и валентной зоны в квантовой яме были рассчитаны с помощью модели идеального твердого тела (“model-solid theory”), предложенной Ван де Вэйлом в 1989 г. для бинарных полупроводников. Неизвестные для тройных соединений параметры (упругие постоянные, деформационные потенциалы, постоянные решетки, эффективная масса носителей заряда), кроме ширины запрещенной зоны, находились в приближении линейной зависимости от содержания компонентов в твердом растворе. Рассчитаны положение краев разрешенных зон в напряженном слое квантовой ямы, величины разрывов валентной зоны и зоны проводимости. Так, изменение положения края зоны проводимости и изменение усредненного уровня валентной зоны из-за упругих напряжений определяются через соответствующие деформационные потенциалы зоны проводимости  $a_c$  и валентной зоны  $a_v$ :

$$dE_c = a_c \frac{\Delta\Omega}{\Omega}, \quad E_{v,av} = a_v \frac{\Delta\Omega}{\Omega},$$

где  $\frac{\Delta\Omega}{\Omega}$  – относительное изменение объема элементарной ячейки.

На рис. 3 показано изменение положения краев разрешенных зон в ненапряженном слое квантовой ямы  $Zn_xCd_{1-x}S$ , окруженном барьерными слоями  $ZnS_{0,06}Se_{0,94}$ , в зависимости от содержания цинка в квантовой яме в структуре  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_ySe_{1-y}$ .

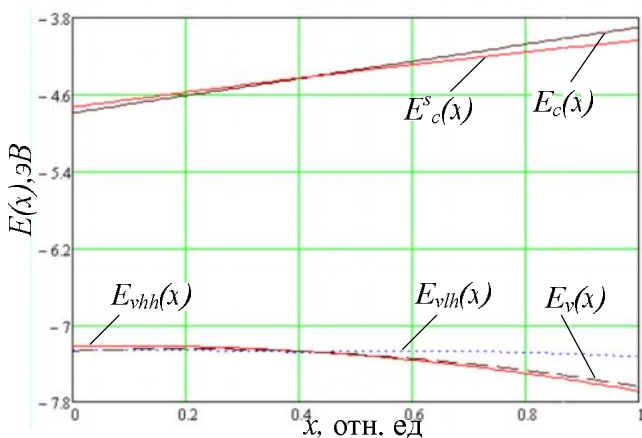


Рис. 3. Положение краев запрещенной зоны в квантовой яме  $Zn_xCd_{1-x}S$  в структуре  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_ySe_{1-y}$  в зависимости от содержания цинка в квантовой яме (индекс «s» относится к напряженной структуре)

На рис. 4 показано изменение положения краев разрешенных зон в ненапряженном слое квантовой ямы  $ZnS_xSe_{1-x}$ , окруженном барьерными слоями  $Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$  в зависимости от содержания серы в квантовой яме в структуре  $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$ .

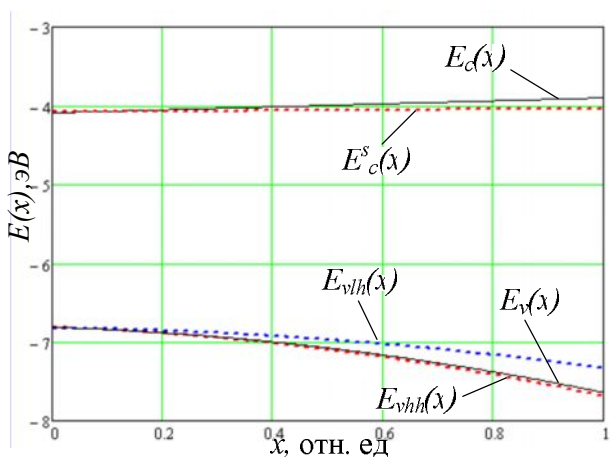


Рис.4. Положение краев запрещенной зоны в квантовой яме  $ZnS_xSe_{1-x}$  в структуре  $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$  в зависимости от содержания серы в квантовой яме (индекс «s» относится к напряженной структуре)

Положение потолка валентной зоны ненапряженной структуры относительно уровня вакуума показано кривой  $E_v(x)$ . Положение подзоны тяжелых и легких дырок относительно уровня вакуума показано кривыми  $E_{vhh}(x)$  и  $E_{vll}(x)$  соответственно. Из рисунков видно, что в зависимости от содержания цинка в  $Zn_xCd_{1-x}S$  и серы в  $ZnS_xSe_{1-x}$  и под воздействием одноосного деформационного потенциала валентная зона расщепляется на подзоны легких и тяжелых дырок. Зависимости положения краев валентных подзон являются немонотонными функциями состава твердого раствора.

Разрыв зоны проводимости в квантово-размерной структуре с одиночной квантовой ямой  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_{0,06}Se_{0,94}$ , выращенной методом парофазной эпитаксии из металлоорганических соединений, уменьшается от 770 до 360 мэВ при увеличении содержания цинка ( $x$ ) в квантовой яме от 0 до 40 %. Подбирая определенное содержание цинка ( $x$ ) в  $Zn_xCd_{1-x}S$  и серы ( $y$ ) в  $ZnS_ySe_{1-y}$ , можно получить согласованную по постоянной решетки наногетероструктуру  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_ySe_{1-y}$ .

Представлены результаты расчета энергии основных уровней размерного квантования электронов и дырок в структурах с квантовыми ямами, имеющих зонные диаграммы I типа ( $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$ ) и II типа ( $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_ySe_{1-y}$ ) для различных составов твердых растворов и толщин слоев с учетом влияния упругих напряжений.

Осуществлен расчет энергии излучательных переходов в структурах  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_ySe_{1-y}$  и  $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$  с использованием правила электронного сродства с учетом упругих механических напряжений, влияющих на разрывы разрешенных энергетических зон.

Для гетероструктуры  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_ySe_{1-y}$ , имеющей зонную диаграмму II типа, при высоких концентрациях электронов в квантовой яме учтено образование треугольной квантовой ямы для дырок за счет изгиба энергетических зон. Проведена количественная оценка влияния величины концентрации электронов в квантовой яме на образование треугольной квантовой ямы для дырок.

Предложена методика, позволяющая определять концентрацию носителей заряда в прямоугольной квантовой яме в слабелегированных квантово-размерных структурах с зонной диаграммой II типа по величине коротковолнового смещения линии излучения, связанной с квантовой ямой, на спектрах катодоллюминесценции при высоких уровнях накачки электронным пучком.

В **третьей главе** в виде обзорного материала были рассмотрены емкостные и оптические методы исследования полупроводниковых

барьерных структур, дефектов с глубокими уровнями, а также физические основы метода токовой релаксационной спектроскопии глубоких уровней, применяемой для изучения микро- и наноструктур.

Рассмотрены процессы релаксации тока в полупроводниковых барьерных структурах, содержащих квантовую яму. Развита представления о процессах захвата и эмиссии носителей заряда в квантово-размерных структурах.

Данная глава также посвящена изложению полученных методами токовой релаксационной спектроскопии глубоких уровней и катодолуминесценции экспериментальных данных по величине разрыва зоны проводимости гетероструктуры  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_ySe_{1-y}$ , обсуждению и сравнению их с результатами расчетов величин разрывов разрешенных энергетических зон с учетом изменения положения краев валентной и зоны проводимости из-за упругих механических напряжений, выполненных во второй главе.

Представленные объекты исследования имели один состав для буферного и покровного слоя с содержанием серы ( $y$ ) 6 %, что делало слои  $ZnS_{0,06}Se_{0,94}$  согласованными по постоянной решетки с подложкой GaAs, и два состава твердого раствора с содержанием цинка ( $x$ ) в квантовой яме 10 и 40 %. Структуры были исследованы методом токовой релаксационной спектроскопии глубоких уровней из-за высокого сопротивления эпитаксиальных слоев  $ZnS_ySe_{1-y}$ , проанализированы спектры катодолуминесценции.

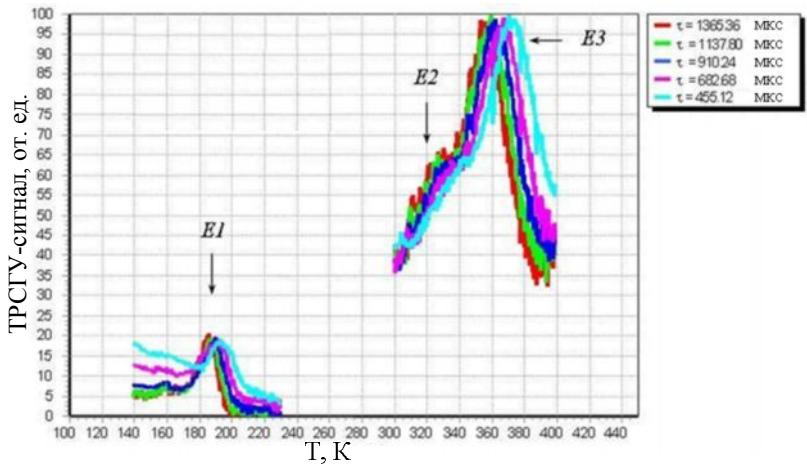


Рис. 5. Спектр токовой релаксационной спектроскопии глубоких уровней –  $Zn_{0,4}Cd_{0,6}S/ZnS_{0,06}Se_{0,94}$

На представленном спектре токовой релаксационной спектроскопии глубоких уровней (рис. 5) ясно видно, что в исследуемом образце проявились три пика интенсивности. Со стороны более низких температур в спектре наблюдалась «полочка», которая может быть обусловлена процессами туннелирования носителей заряда с основного и возбужденного уровня размерного квантования в кантовой яме в барьер. Сравнивая полученные результаты с результатами спектров катодоллюминесценции, приходим к выводу, что именно пик  $E_1$  обусловлен процессом эмиссии электронов с энергетических уровней кантовой ямы.

По полученным экспериментальным данным был рассчитан разрыв зоны проводимости в гетероструктуре с одиночной кантовой ямой  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_{0,06}Se_{0,94}$ , величина которого составила 650 мэВ и 373 мэВ при содержании цинка ( $x$ ) в кантовой яме 10 и 40 % соответственно.

#### Результирующие данные

Образцы	$Zn_{0,4}Cd_{0,6}S/ZnS_{0,06}Se_{0,94}$	$Zn_{0,1}Cd_{0,9}S/ZnS_{0,06}Se_{0,94}$
$\Delta E_c$ , мэВ	355	622
$\Delta E_c^s$ , мэВ	360	669
$\Delta E_{cFCV}$ , мэВ	$373 \pm 30$	$650 \pm 30$
$\Delta E_c^{cl}$ , мэВ	415	659

Сравнение экспериментальных данных о разрыве зоны проводимости гетероструктуры  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_ySe_{1-y}$ , полученных методами токовой релаксационной спектроскопии глубоких уровней и катодоллюминесценции, с результатами расчетов величин разрывов разрешенных энергетических зон с учетом изменения положения краев валентной и зоны проводимости из-за встроенных механических напряжений, выполненными во второй главе, показывает хорошее соответствие теории и эксперимента. Некоторые несоответствия могут быть связаны с тем, что при моделировании использовалось приближение прямоугольной кантовой ямы, что далеко не всегда выполняется.

В **четвертой главе** на основе экспериментальных данных, полученных методами токовой релаксационной спектроскопии глубоких уровней и катодоллюминесценции, определена величина разрыва зоны проводимости в гетероструктурах с множественной кантовой ямой  $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$ , имеющих зонную диаграмму I типа, с различной конфигурацией квантово-размерной части структуры. В структурах  $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$ , выращенных

методом эпитаксии из молекулярных пучков, на границах квантовой ямы существует потенциальный барьер высотой 56-87 мэВ для захвата электронов из барьерных слоев на основной уровень размерного квантования в квантовой яме.

Для четырехкомпонентного состава  $Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$  неизвестны многие параметры, в частности значение электронного сродства.

Для расчетов величин разрывов разрешенных зон и влияния на них упругих напряжений была использована величина электронного сродства в материале  $Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$ , вычисленная по данным об энергии активации электронов с основного уровня размерного квантования:

$$\chi_c^b = \chi_c^{qw} - \Delta E_t - E_{el},$$

где  $\chi_c^{qw}$  - электронное сродство материала квантовой ямы  $ZnS_xSe_{1-x}$ ,  $\Delta E_t$  - энергия активации процесса эмиссии электронов (экспериментальные данные, полученные методом токовой релаксационной спектроскопии глубоких уровней) с основного уровня размерного квантования, энергия которого, отсчитываемая от дна квантовой ямы, равна  $E_{el}$ . Величина  $\chi_c^b$  составила 3,8 эВ.

Рассчитанная величина электронного сродства была использована при расчете энергии излучательного перехода в квантовой яме в структуре  $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$ , результаты которого представлены в главе 2.

В заключении формулируются основные результаты работы.

### **Основные результаты работы**

Развита модель Андерсона, учитывающая влияние упругих напряжений, для моделирования энергетического спектра носителей заряда, хода краев разрешенных зон, энергии излучательных переходов в квантово-размерных структурах с квантовыми ямами, имеющих зонные диаграммы I типа ( $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$ ) и II типа ( $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_ySe_{1-y}$ ) для различных составов твердых растворов и толщин слоев.

Вычислены величины разрывов валентной зоны и зоны проводимости в квантово-размерных структурах с одиночными и множественными квантовыми ямами на основе  $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$ , являющиеся нелинейными функциями толщин слоев, составов твердых растворов. В структурах  $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_zSe_{1-z}$ , выращенных методом эпитаксии из молекулярных пучков, на границах квантовых ям присутствует потенциальный барьер для захвата электронов высотой 56-87 мэВ.

Рассчитана с помощью развитой теоретической модели Андерсона

величина разрыва зоны проводимости в квантово-размерных структурах с одиночной квантовой ямой  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_{0.06}Se_{0.94}$ , выращенных методом парофазной эпитаксии из металлорганических соединений, которая уменьшается от 770 до 360 мэВ при увеличении содержания цинка ( $x$ ) в квантовой яме от 0 до 40 %.

Установлено соответствие составов твердых растворов в квантово-размерных структурах  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_ySe_{1-y}$ , при котором барьерные слои и слои квантовых ям согласованы по постоянной решетки. (При содержании серы ( $y$ ) в  $ZnS_ySe_{1-y}$  6 % в согласованном по постоянной решетки слое  $Zn_xCd_{1-x}S$  содержание цинка ( $x$ ) составляет 43 %.)

Экспериментально определена величина разрыва зоны проводимости в гетероструктурах с одиночной квантовой ямой  $Zn_xCd_{1-x}S/ZnS_{0.06}Se_{0.94}$ , имеющих зонную диаграмму II типа, которая составила 650 мэВ и 373 мэВ при содержании цинка ( $x$ ) в квантовой яме 10 и 40 % соответственно, а также в гетероструктурах с одиночной и множественной квантовой ямой  $ZnS_xSe_{1-x}/Zn_{1-y}Mg_yS_2Se_{1-z}$ , имеющих конфигурацию зонной диаграммы I типа.

Разработана новая методика, позволяющая определять концентрацию носителей заряда в прямоугольной квантовой яме в слабелегированных квантово-размерных структурах с зонной диаграммой II типа по величине коротковолнового смещения линии излучения, связанной с квантовой ямой, на спектрах катодolumинесценции при высоких уровнях накачки электронным пучком.

#### **Основные результаты диссертации опубликованы в работах:**

1. Литвинов В.Г., Милованова О.А., Рыбин Н.Б. Электрофизические свойства квантово-размерных структур на основе селенидов, сульфидов цинка, кадмия, магния // Приложение к журналу «Вестник РГРТУ». 2009. № 4. Вып.30. С. 39-46.
2. Литвинов В.Г., Гудзев В.В., Милованова О.А., Рыбин Н.Б. Релаксационная спектроскопия глубоких уровней микро- и наноструктур // Вестник РГРТУ 2009. №4. Вып. 30. С. 62-70.
3. Vladimir Litvinov, Vladimir Kozlovsky, Denis Sannikov, Dmitry Sviridov, Oksana Milovanova, and Nikolay Rybin. Local measurement of conduction band offset for ZnCdS/ZnSSe nanostructure by Laplace current DLTS cooperated with AFM technique // Phys. Status Solidi C 7, No. 6. 1536–1538 (2010).
4. Литвинов В.Г., Гудзев В.В., Милованова О.А., Рыбин Н.Б. Релаксационная спектроскопия глубоких уровней и ее применение для исследования полупроводниковых структур микро- и наноэлектроники // Датчики и системы. №9. 2009. С.71-78.



5. Милованова О.А. Исследование электрофизических свойств наноструктур на основе полупроводниковых соединений  $A_2B_6$  // I Всероссийская школа-семинар студентов, аспирантов и молодых ученых по направлению «Наноинженерия»: Тезисы докладов. Москва, 2008. С. 63-65.
6. Литвинов В.Г., Вишняков Н.В., Милованова О.А., Рыбин Н.Б. Практические аспекты применения релаксационной спектроскопии глубоких уровней для характеристики полупроводниковых наноструктур // X международная конференция «Опто-, наноэлектроника, нанотехнологии и микросистемы»: Тезисы докладов. Ульяновск, 2008. С. 207.
7. Литвинов В.Г., Милованова О.А., Рыбин Н.Б. Практические аспекты применения релаксационной спектроскопии глубоких уровней для измерения плотности состояний в неупорядоченных полупроводниках // 3-я международная конференция «Физика электронных материалов – ФИЭМ'08»: Тезисы докладов. Калуга, 2008. С. 275-278.
8. Литвинов В.Г., Рыбин Н.Б., Милованова О.А. Особенности структуры  $Zn_{0.1}Cd_{0.9}S/ZnSe/ZnS_{0.06}Se_{0.94}$  с одиночной квантовой ямой // XII международной конференции «Электромеханика, электротехнологии, электротехнические материалы и компоненты»: Тезисы докладов. Алушта, 2008. С. 86.
9. Литвинов В.Г., Козловский В.И., Милованова О.А., Рыбин Н.Б. Определение разрывов зон в  $ZnSe/ZnMgSSe$  структуре методами катодолюминесценции и релаксационной спектроскопии глубоких уровней совместно с атомно-силовой микроскопией // XI Международная конференция «Опто-, наноэлектроника, нанотехнологии и микросистемы»: Тезисы докладов. Ульяновск, 2009. С. 210-211.
10. Литвинов В.Г., Козловский В.И., Милованова О.А., Рыбин Н.Б., Леонова Е.А. Измерение разрывов разрешенных энергетических зон в наноструктуре  $ZnSe/ZnMgSSe$  методами катодолюминесценции и релаксационной спектроскопии глубоких уровней совместно с атомно-силовой микроскопией // II Всероссийская школа-семинар студентов, аспирантов и молодых ученых по направлению «Наноинженерия»: Тезисы докладов. Калуга-Москва, 2009. С. 106-109.
11. Litvinov V.G., Kozlovsky V.I., Sannikov D.A., Sviridov D.E., Milovanova O.A., and Rybin N.B. Local measurement of band offset for  $ZnCdS/ZnSSe$  nanostructure by Laplace current DLTS cooperated with AFM technique // 14th International Conference on II-VI

Compounds «Program and abstracts». St. Petersburg. Russia. 2009. P 153.

12. Милованова О.А., Литвинов В.Г. Исследование электрофизических свойств ZnSe/ZnMgSSe наноструктуры методами катодолуминесценции и релаксационной спектроскопии глубоких уровней совместно с атомно-силовой микроскопией // II Всероссийская школа-семинар студентов, аспирантов и молодых ученых по направлению «Наноматериалы»: Тезисы докладов. Рязань: РГРТУ, 2009. Т.1. С. 115-118.
13. Литвинов В.Г., Козловский В.И., Санников Д.А., Милованова О.А., Рыбин Н.Б. Релаксационная спектроскопия глубоких уровней и катодолуминесценция структур ZnCdS/ZnSSe с одиночной квантовой ямой // Физика полупроводников. Микроэлектроника. Радиоэлектронные устройства: межвуз. сб. науч. трудов. Рязань: РГРТУ, 2008. С. 29-34.
14. Литвинов В.Г., Козловский В.И., Санников Д.А., Свиридов Д.Е., Милованова О.А., Рыбин Н.Б. Локальное измерение разрыва зоны проводимости в наноструктуре ZnCdS/ZnSSe методом токовой релаксационной спектроскопии глубоких уровней с преобразованием Лапласа, интегрированной с атомно-силовой микроскопией // Физика полупроводников. Микроэлектроника. Радиоэлектронные устройства: межвуз. сб. науч. трудов. Рязань: РГРТУ, 2009. С.39-45.
15. Милованова О.А., Литвинов В.Г., Козловский В.И., Рыбин Н.Б. Локальное исследование электрофизических свойств ZnSe/ZnMgSSe наноструктуры методом релаксационной спектроскопии глубоких уровней совместно с атомно-силовой микроскопией // Физика полупроводников. Микроэлектроника. Радиоэлектронные устройства: межвуз. сб. науч. трудов. Рязань: РГРТУ, 2009. С.45-49.
16. Литвинов В.Г., Милованова О.А., Рыбин Н.Б. Электрические методы исследования разрывов энергетических зон в полупроводниковых микро- и наногетероструктурах: учеб. пособие. Рязань: РГРТУ, 2009. 52 с.

М и л о в а н о в а Оксана Александровна

ВЛИЯНИЕ СОСТАВА И ТОЛЩИН СЛОЕВ  
НА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА  
КВАНТОВО-РАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ  
ZnCdS/ZnSSe, ZnSSe /ZnMgSSe

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико–математических наук

Подписано в печать 27.09.10 Формат бумаги 60×84 1/16.  
Усл. печ. л. 1,0. Тираж 100 экз. Заказ  
Рязанский государственный радиотехнический университет  
390005, г. Рязань, ул. Гагарина, 59/1.

Отпечатано с оригинал макета  
ООО фирма «Интермета»  
390000, г. Рязань, ул. Семинарская, 5  
тел./факс (4912)25-81-76