

УДК 621.383.46

Лунин Леонид Сергеевич, Блохин Эдуард Евгеньевич,
Пашченко Александр Сергеевич

ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ И ВОЛЬТАМПЕРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ГЕТЕРОСТРУКТУР С КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ INAS

Проведено моделирование спектров фотолюминесценции и темновых вольтамперных характеристик гетероструктур с одним слоем квантовых точек. Показано наличие пика основных переходов в квантовых точках при 1,2 эВ (данные моделирования) и 1,12 эВ (экспериментальные данные). Экспериментальный пик имеет большую ширину (0,13 эВ) на половине максимума излучения основных переходов в квантовых точках, по сравнению с моделируемым (0,06 эВ). Наблюдается смещение экспериментального пика в длинноволновую область приблизительно на 65 мэВ, что говорит о наличии в структуре дисперсии по размерам квантовых точек. Моделируемая темновая вольтамперная характеристика при температуре 90 К и нулевом смещении показывает значение плотности темнового тока 10^{-7} А/см², что на порядок меньше результатов измерения (10^{-6} А/см²). Наблюдается различие в характере распределения зависимости при отрицательном и положительном смещении между экспериментом и результатами моделирования, связанное с присутствием квантовых точек большего размера.

Ключевые слова: квантовая точка, моделирование, вольтамперная характеристика, фотолюминесценция, фотодетектор, ближний ИК диапазон.

Leonid Lunin, Eduard Blokhin, Alexander Pashchenko THE PHOTOLUMINESCENCE AND DARK CURRENT VOLTAGE CHARACTERISTICS OF HETEROSTRUCTURES WITH InAs QUANTUM DOTS

The simulation of the photoluminescence and dark current-voltage characteristics of heterostructures with a single layer of quantum dots. The presence of the peak quantum transitions in the main points at 1,2 eV (modeling) and 1,12 eV (experimental). The experimental peak has a greater width (0,13 eV) at half maximum fundamental radiation transitions in quantum dots, compared to the modeled (0,06 eV). There is a shift of the experimental peak to longer wavelengths by about 65 meV, indicating that the presence in the dispersion structure the size of quantum dots. The dark current-voltage simulated characteristic at a temperature of 90 K and zero bias shows the value of the dark current density of 10^{-7} A/cm², which is much smaller than the measurement results (10^{-6} A/cm²). There is a difference in the nature of the distribution depending on when the negative and positive displacement between experiment and simulation results associated with the presence of quantum dots larger.

Key words: quantum dot, current-voltage characteristic, photoluminescence, photodetector, near-infrared.

Современные устройства детектирования инфракрасного излучения, базирующиеся на соединениях III–V групп, имеют высокие показатели быстродействия, детектирующей способности, соотношения сигнал/шум и рабочей температуры по сравнению с классическими полупроводниками и соединениями II–VI групп. В коротковолновой инфракрасной области (до 2 мкм) подобные структуры применяют для приборов ночного видения, датчиков газов и в волоконно-оптических линиях связи. Авторы работ [1–3] отмечают значение детектирующей способности структур на основе соединения InAs/GaAs порядка $D^* = 10^8$ см²·Гц^{1/2} при температурах 90–145 К. Быстродействие таких структур находится в интервале 0,9–1,5 мкс (за счет большего времени жизни носителей заряда в возбужденном состоянии) при минимальных значениях плотности темнового тока порядка 10^{-7} А/см². При введении квантовых точек в структуру показатели детектирующей способности возрастают до

значений $10^{10} \text{ см} \cdot \text{Гц}^{1/2}$ при эквивалентной мощности шума 10^{-13} Вт [4, 5]. Уменьшается время отклика структуры, увеличивается диапазон рабочих температур и наблюдается снижение плотности темного тока до порядка 10^{-9} А/см^2 [6, 7].

Целью данной работы является исследование спектров фотолюминесценции и темновых вольт-амперных характеристик гетероструктуры InAs/GaAs с одним массивом квантовых точек InAs и сравнение теоретических и экспериментальных результатов.

1. МОДЕЛЬ QD-INAS/GAAS ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ

1.1. Допущения и ограничения

В работе предложена модель для расчета спектров фотолюминесценции и ВАХ на основе межзонных переходов. Механизм межзонного поглощения является достаточным для создания эффективных структур, работающих в ближнем ИК диапазоне. Используя данный подход при построении модели, можно ввести ряд упрощающих допущений:

- На основе ранних работ по моделированию формы квантовой точки [8–10] были выбраны пирамидальные квантовые точки в бесконечной полупроводниковой матрице верхнего закрывающего слоя.
- Формирование массива квантовых точек происходит в режиме Странского – Крастанова (метод самоорганизации) и связано с распределением сил упругой деформации. При больших значениях энергии упругой деформации наблюдается изменение структуры зон потенциальных ям, образованных квантовыми точками. Распределение поля упругой деформации влияет на изменение эффективной массы носителей заряда. При моделировании зонной структуры применялось равномерное распределение сил упругих деформаций в массиве квантовых точек. Таким образом, упругие силы не влияют на энергетический спектр электронных состояний (что справедливо, так как квантовые точки InAs являются центрами захвата электронов).
- Для определения разрешенных энергетических состояний необходимо решение уравнений Пуассона и Шредингера. При допущении, что квантовая точка представляет собой квантовую яму с шириной, совпадающей с латеральными размерами точки, можно применить метод потенциала Кронига – Пенни для решения уравнения Шредингера. Вклад сил упругой деформации выражен через изменение эффективной массы носителей заряда.
- Для определения электронной структуры используют одночастичные макроскопические методы. В предлагаемой модели используется метод двузонного периодического потенциала Кронига – Пенни. Отличие данного метода в том, что он упрощает электронную структуру, принимая по одному дискретному уровню в каждой квантовой точке.
- Учет рекомбинационных процессов в предлагаемой модели сводится к рекомбинации Шокли – Рида – Холла и излучательной рекомбинации.
- Принимаем массив квантовых точек равномерным по латеральным размерам (35 нм).
- В связи с упрощенной моделью построения зонной структуры, пренебрегаем кулоновским взаимодействием электронов в дискретных зонах и расщеплением валентной зоны на уровни тяжелых и легких дырок.

1.2. Математический аппарат

За основу взяты уравнения Пуассона и уравнения непрерывности для электронов и дырок. Изменение эффективной массы носителей учитывалось в распределении Ферми – Дирака для выражения концентрации электронов:

$$n = 2 \frac{m_n^* k T}{\pi h^2} \sum_i \ln(1 + \exp(-\frac{E_i - E_F}{k T})). \quad (1)$$

Учитывая локализацию электронов по ширине потенциальной ямы, вводим плоскую волновую функцию

$$n(x, T) = 2 \frac{m_n^* k T}{\pi h^2} \sum_i |\Psi_i(x)|^2 \ln(1 + \exp(-\frac{E_i - E_F}{kT})). \quad (2)$$

Далее необходимо решить уравнение Шредингера (3), прибегнув к методу двузонного периодического потенциала Кронига – Пенни:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m_n^*} \nabla \Psi_i + E_c \Psi_i = E_i \Psi_i. \quad (3)$$

Модель потенциала представляет собой решение уравнения Шредингера в виде двух трансцендентных уравнений вида (4, 5) и уравнения для определения энергии через волновой вектор функции Блоха (6):

$$\cos k(a+b) = \frac{Q^2 - K^2}{2QK} \sinh(Qb) \sin(Ka) + \cosh(Qb) \cos(Ka), \quad (4)$$

$$\cos k(a+b) = -\frac{\beta^2 - K^2}{2\beta K} \sin(\beta b) \sin(Ka) + \cos(\beta b) \cos(Ka), \quad (5)$$

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (6)$$

где, K, Q, β – локальные волновые векторы.

Для учета сил упругих деформаций вводим изменения эффективной массы носителей заряда через параметры m_w и m_b , соответствующие значениям эффективной массы в районе ямы и барьера соответственно. Проверив граничные условия на сходимость, выполнив вывод неопределенных коэффициентов, были получены выражения (с учетом всех подстановок) для волнового вектора k :

$$\cos k(a+b) = -\frac{\beta^2 m_w^2 + K^2 m_b^2}{2\beta K m_w m_b} \sinh(\beta b) \sin(Ka) + \cosh(\beta b) \cos(Ka). \quad (7)$$

Решение уравнений проводилось методом матричного разложения до достижения заданной точности. На каждом новом итерационном шаге решение проверялось с предыдущим шагом.

Спектры фотолюминесценции выражались из стандартного выражения для светового потока [10]

$$I_{PL} = n(T, x) \left(\frac{1/\tau_r}{1/\tau_{es} + 1/\tau_{nr} + 1/\tau_r + \tau_{ex}} \right), \quad (8)$$

где $1/\tau_{ex}$ – характеризует механизм перехода носителей заряда из зоны проводимости, который в нашей модели выражен через туннельный эффект и термоэлектронную эмиссию; $1/\tau_r$ – учитывает вклад излучательной рекомбинации; $1/\tau_{nr}$ – вклад безызлучательной рекомбинации; $1/\tau_{ex}$ – вклад перехода носителей заряда на другие дискретные энергетические уровни в рамках одной потенциальной ямы (в данной модели не учитывается).

Учет механизмов рекомбинации включал модель Шокли – Рида – Холла (скорость рекомбинации электронов равна скорости рекомбинации дырок), туннельный эффект через потенциальный барьер зоны проводимости, вклад термоэлектронной эмиссии и излучательной и безызлучательной рекомбинации.

1.3. Входные данные для построения модели

Ранее нами была получена гетероструктура InAs/GaAs с одним массивом квантовых точек InAs, методом ионно-лучевого осаждения [11]. Входными данными для численного моделирования послужили толщины слоев, параметры роста, концентрация проводящих слоев, размер и плотность

квантовых точек, физико-химические свойства материалов. Структура содержит подложку GaAs с шириной запрещенной зоны 1,43 эВ. Далее проводящий слой GaAs толщиной 200 нм, легированный теллуром до значения концентрации $3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ с подвижностью носителей заряда $8500 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$ (для электронов) и $400 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$ (для дырок). Затем смачивающий слой InAs толщиной 3 МС и один массив квантовых точек InAs с поверхностной плотностью 10^9 см^{-2} и латеральными размерами 35 нм. Далее барьерный слой GaAs толщиной 30 нм, и спейсер толщиной 80 нм для снятия напряжения. Завершающий проводящий слой GaAs имеет значение концентрации $3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Температура процесса выращивания слоев GaAs составляла 450 °С. Перед нанесением смачивающего слоя температура понижалась до 420 °С.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты моделирования спектров фотолюминесценции для межзонных переходов и их сравнение с экспериментальными данными представлены на рис. 1. Для исследования спектров фотолюминесценции применялась оптическая схема с инжекционным полупроводниковым лазером мощностью 8,5 мВт, с длиной волны излучения 402 нм (соответствует энергии 3 эВ). Образцы освещались со стороны слоя выращенных квантовых точек. В качестве фотоприемного устройства использовался германиевый фотодиод. Исследования проводились при температуре 90 К.

Наблюдалось три основных спектральных пика в диапазоне энергии 0,9–1,5 эВ. Первый пик соответствует межзонным переходам через основные состояния в зоне проводимости и валентной зоне квантовых точек InAs (1,12 эВ – измеренный пик, 1,17 эВ – моделируемый пик). Видно, что интенсивность измеренного пика фотолюминесценции ниже полученного численным моделированием. Кроме рассматриваемых межзонных переходов, на спектр фотолюминесценции реальной гетероструктуры могут оказывать влияние внутризонные переходы (релаксация электронов), что приводит к уменьшению интенсивности пика. Малую интенсивность экспериментального пика можно также объяснить влиянием безызлучательных переходов. Вклад безызлучательных переходов в разработанной модели довольно мал и определяется через скорость и время жизни носителей заряда [12]. Моделируемый пик основных переходов в квантовых точках имеет ширину на половине максимума излучения 0,06 эВ, что меньше соответствующего значения экспериментального пика (приблизительно 0,13 эВ). Имеется смещение экспериментального пика в длинноволновую область спектра на 65 мэВ, что говорит о вкладе квантовых точек большего размера (дисперсия размеров). В модели же весь массив точек принимался равномерным по размерам (35 нм).

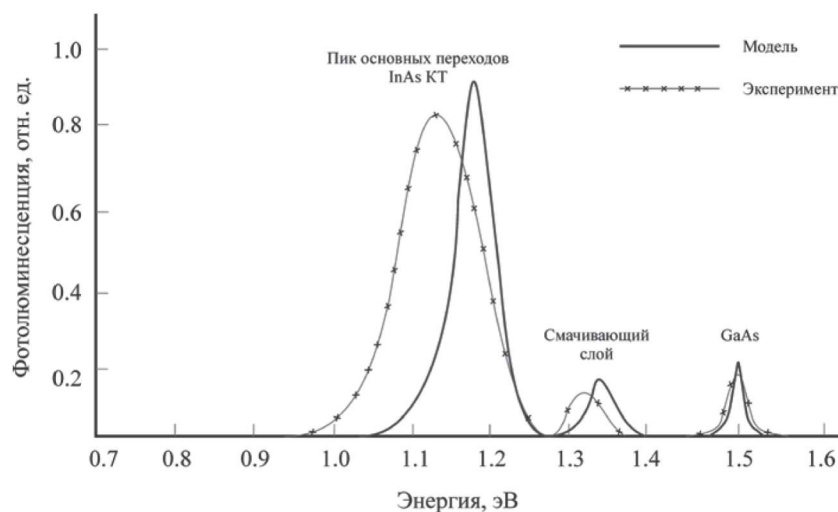


Рис. 1. Спектр фотолюминесценции QD-InAs/GaAs гетероструктуры

Появление квантовых точек большего размера можно объяснить влиянием сил упругих деформаций. При закрытии слоя квантовых точек широкозонным барьером на границах возникают упругие напряжения, влияющие на размеры и форму квантовых точек (а также на структуру слоя). Возможно локальное появление квантовых точек больших размеров и дефектов слоя, которые приводят к смещению пика межзонных переходов в длинноволновую область. Предложенная модель имеет равномерное распределение поля сил упругих деформаций и соответственно исключает влияние дислокаций и квантовых точек большего латерального размера.

С возрастанием по энергии наблюдается пик смачивающего слоя (1,35 эВ). Для моделирования пика смачивающего слоя был взят раствор $\text{GaIn}_{1-x}\text{As}$ с массовой долей In 35 %. Как видно из рис. 1, экспериментальный и моделируемый пики смачивающего слоя имеют хорошее согласование по энергии, расхождение составляет приблизительно 30 мэВ. Последний пик графика (1,5 эВ) соответствует краю собственного поглощения в слое GaAs.

На рис. 2 представлены графики темновых вольтамперных характеристик (ВАХ) структуры от напряжения смещения в диапазоне от $-1,5$ до $1,5$ В. Измерения ВАХ проводились при помощи измерителя иммитанса E7-20, соединенного с ртутным зондом MDC 802B-150 при температуре 90 К. Значения плотности темнового тока при минимальной температуре и нулевом смещении составили 10^{-6} А/см² для измеренной характеристики, и 10^{-7} А/см² для моделируемой. В модели темновой ток ограничивался только механизмом туннелирования носителей заряда через барьер и вкладом термоэлектронной эмиссии. Из полученных результатов видно, что у реальной структуры значение темнового тока на порядок выше. Это может быть связано с влиянием напряженных дефектов в слое квантовых точек и внешнего электрического поля (например, приложенного во время измерения характеристики). При увеличении смещения как в прямую, так и в обратную сторону наблюдается резкое увеличение плотности темнового тока, что говорит об уменьшении потенциального барьера для заполненных квантовых состояний в КТ. При увеличении температуры характеристика существенно деградирует, так как к туннельному эффекту добавляется вклад термоэлектронной эмиссии. Измеренная характеристика имеет существенную асимметрию по положительному и отрицательному смещению, в отличие от результатов численного моделирования. Это может быть объяснено наличием квантовых точек большего размера.

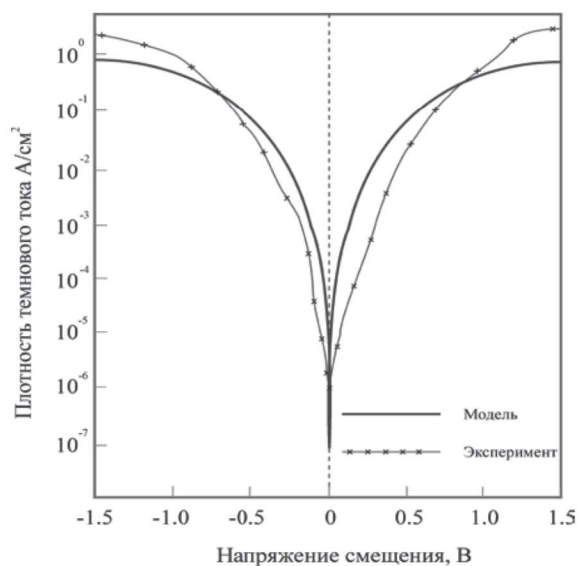


Рис. 2. Темновые вольтамперные характеристики QD-InAs/GaAs гетероструктуры при температуре 90 К.

Заключение

В работе представлены результаты расчетов и измерений спектров фотолюминесценции и темновых вольтамперных характеристик гетероструктуры InAs/GaAs с одиночным слоем квантовых точек InAs, полученной методом ионно-лучевого осаждения для фотодетекторов ближнего ИК диапазона. Разработанная модель межзонных переходов позволила исследовать фотолюминесценцию и провести сравнение с экспериментальными данными. Показано отклонение измеренного пика основных переходов в квантовых точках в длинноволновую область спектра на 65 мэВ (1,17 эВ). Измеренное значение плотности темнового тока (10^{-6} А/см²) на порядок выше рассчитанного (10^{-7} А/см²), что связано с наличием напряженных дефектов на границе с барьерным слоем, и влиянием внешнего воздействия (электрическое поле при измерении, тепловые флуктуации). Наблюдается асимметрия экспериментальных кривых темнового тока при положительном и отрицательном смещении.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований в рамках научных проектов № 16-38-00575 мол_а и № 16-08-01052 А.

Литература

1. Wei-Hsun Lin, Kuang-Ping Chao, Chi-Che Tseng, Shu-Cheng Mai, Shih-Yen Lin, Meng-Chyi Wu. The influence of In composition on InGaAs-capped InAs/GaAs quantum-dot infrared photodetectors // Appl. Phys. Lett. 2010. V. 106. P. 054512 (1–3).
2. Donati S. Photodetectors // Devices, Circuits and Applications. New York: Prentice Hall, 1999. P. 432–440.
3. Nikhil Ranjan Das, Senior Member, M. Jamal Deen, Fellow. A Model for the Performance Analysis and Design of Waveguide p-i-n Photodetectors // IEEE Transactions on Electron Devices. 2005. 53(4).
4. Jiang Wu, Makableh Y. F. M., Vasan R., Manasreh M. O., Liang B., Reyner C. J. and Huffaker D. L. Strong interband transitions in InAs quantum dots solar cell // Appl. Phys. Lett. 2012. V. 100. P. 051907 (1–4).
5. Amtout A., Raghavan S., Rotella P. Theoretical modeling and experimental characterization of InAs/InGaAs quantum dots in a well detector // Appl. Phys. 2004. Vol. 96. № 7. P. 3781–3786.
6. Phillips J., Bhattacharya P., Kennerly S. W., Beekman D. W., Dutta M. Self-assembled InAs – GaAs quantum dot intersubband detectors // IEEE J. quantum electron. 1999, Vol. 35. № 6. P. 936–943.
7. Chen Z. H. Normal incidence InAs/Al_xGa_{1-x}As quantum dot infrared photodetectors with undoped active region // Appl. Phys. 2001. Vol. 89. P. 4558–4563.
8. Jiang H., Singh J. Strain distribution and electronic spectra of InAs/GaAs self-assembled dots: An eight-band study // Phys. Rev. B. 1997. V. 56. № 8. P. 4696–4701.
9. Pryor C. Eight-band calculations of strained InAs/GaAs quantum dots compared with one-, four-, and six-band approximations // Phys. Rev. B. 1998. V. 57. № 12. P. 7190–7195.
10. Stier O., Grundmann M., Bimberg D. Electronic and optical properties of strained quantum dots modeled by 8-band k·p theory // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. № 8. P. 5688–5701.
11. Lunin L. S., Sysoev I. A., Alfimova D. L., Chebotarev S. N., Pashchenko A. S. A study of photosensitive InAs/GaAs heterostructures with quantum dots grown by ion-beam deposition // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2011. Vol. 5. Issue 3. P. 559–562.
12. Jiang Wu, Makableh Y. F. M., Vasan R., Manasreh M. O., Liang B., Reyner C. J., Huffaker D. L. Strong interband transitions in InAs quantum dots solar cell // Appl. Phys. Lett. 2012. V. 100. P. 051907 (1–4).