МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Дрогобицький державний педагогічний університет
імені Івана Франка

На правах рукопису

КУЛИК НАДІЯ ЯРОСЛАВІВНА

УДК 538.971,538.915

ВПЛИВ НАПРУЖЕНОЇ ГЕТЕРОМЕЖІ НА ЕЛЕКТРОННІ, ДИФУЗІЙНІ ТА ЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НАНОГЕТЕРОСИСТЕМ

01.04.07 – фізика твердого тіла

ДИСЕРТАЦІЯ

на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Науковий керівник –
доктор фізико-математичних наук,
професор Пелещак Р.М.

Одеса – 2016

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ ТА ПОЗНАЧЕНЬ……..4

ВСТУП 5

РОЗДІЛ 1. Електронні, дифузійні та транспортні характеристики напружених наногетеросистем 12

1.1. Розподіл пружних деформацій та електронні стани в напружених наногетеросистемах з гладкою і негладкою гетеромежею квантова точка – матриця ……..12

1.2. Деформаційно-дифузійний розподіл точкових дефектів в напружених наногетеросистемах.....23

1.3. Електричні властивості поверхнево-бар'єрних структур виду Шотткі..31

Висновки до розділу.....36

РОЗДІЛ 2. Вплив геометрії напруженої гетеромежі квантова точка – матриця на електронні стани в квантових точках.....37

2.1. Вступ 37

2.2. Модель самоузгодженої електрон-деформаційної взаємодії у напруженій наногетеросистемі з гладкою гетеромежею квантова точка – матриця.....39

2.3. Розв’язок самоузгодженої системи рівнянь для деформації кристалічної гратки, електростатичного потенціалу та хвильових функцій електрона в полі деформаційного потенціалу наногетеросистеми.....41

2.4. Вплив електрон-деформаційної взаємодії на формування зонного профілю квантуючого потенціалу та на енергетичні рівні електрона у напруженій наногетеросистемі з КТ.....47

2.5. Модель напруженої наногетеросистеми з неоднорідно-деформованою гетеромежею квантова точка – матриця.....54

2.6. Спектр енергії носіїв заряду в наногетеросистемі з неоднорідно-деформованою гетеромежею квантова точка – матриця.....56

Висновки до розділу.....65

РОЗДІЛ 3. Просторово-часовий перерозподіл точкових дефектів у тришарових напружених наногетеросистемах у межах самоузгодженої деформаційно-дифузійної моделі.....67
3.1. Вступ 67
3.2. Модель просторово-часового перерозподілу точкових дефектів у тришаровій напруженій наногетеросистемі з врахуванням самоузгодженої деформаційно-дифузійної взаємодії.....69
3.3. Розв’язок самоузгодженої системи рівнянь для просторово-часового розподілу концентрації дефектів дефектів та деформації кристалічної гратки гетероструктури.....72
3.4. Просторово-часовий профіль розподілу концентрації дефектів у тришаровій напруженій наногетеросистемі.....80
Висновки до розділу.....84
РОЗДІЛ 4. Електричні властивості поверхнево-бар'єрних структур виду Шотткі з вбудованим шаром квантових точок..... 85
4.1. Вступ.....85
4.2. Математична модель розподілу електростатичного потенціалу в поверхнево-бар'єрній структурі виду Шотткі з вбудованим шаром квантових точок.....87
4.3. Топологія розподілу двовимірного електростатичного потенціалу з врахуванням деформаційних полів на межі КТ– матриця.....91
4.4. Дрейфово-деформаційно-дифузійна модель контакту метал – напівпровідник з вбудованим шаром КТ.....95
4.5. Вольт-амперна характеристика (ВАХ поверхнево-бар'єрної структури виду Шотткі з вбудованим шаром КТ в межах дрейфово-деформаційно-дифузійного підходу з врахуванням самоузгоджених граничних умов……105
Висновки до розділу.....108
ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ І ВИСНОВКИ 109
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ 112

ПЕЛЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ ТА ПОЗНАЧЕНЬ

КТ – квантова точка

VFF (valence force field model) – модель поля валентних сил

ДД – дефектно-деформаційні структури

ФЛ – фотолюмінісценція

ЦР– циклотронний резонанс

ВАХ – вольт-амперна характеристика

δ_{kl} – символ Кронекера

$\sigma_{ij}, \varepsilon_{kl}$ – тензор механічних напружень та пружних деформацій

$a_c^{(i)}$, $a_\upsilon^{(i)}$ – константи гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності та валентної зони

ν_i, E_i – коефіцієнт Пуассона і модуль Юнга матеріалу КТ та оточуючої матриці

f – параметр неузгодження постійних ґраток

$u_r^{(i)}$ – радіальна компонента зміщення атомів у i-тому напівпровідниковому матеріалі

ВСТУП

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 Шотткі 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, надшвидкодіючих 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 Шотткі 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 Шотткі 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 матерілу 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 ($\Delta \le 0.5$еВ) діода Шотткі (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 гратки напівпровідника), тоді як із збільшенням висоти бар'єру Δ від 0.5еВ до 0.9еВ, 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 Шотткі 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 обгрунтуванні задач, у проведенні числових розрахунків, оформленні наукових публікацій та комп'ютерній обробці результатів.

У роботах [120,121] дисертанткою проведено розрахунок квантово-розмірних станів електрона в напруженій наногетеросистемі InAs/GaAs з неоднорідно-деформованою гетеромежею квантова точка – матриця. У роботах [133,143] 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 [120–122,133,134,142,143] у провідних вітчизняних та міжнародних наукових журналах, 4 роботи [123,135,144,148] в матеріалах міжнародних конференцій, 1 робота [124] – у друкованих тезах наукової міжнародної конференції.

Структура дисертації.

Дисертаційна робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків та списку використаних джерел, що складається із 148 найменувань. Повний обсяг роботи становить 128 сторінок друкованого тексту, що містить 24 рисунки, 1 таблицю.

РОЗДІЛ 1
ЕЛЕКТРОННІ, ДИФУЗІЙНІ ТА ТРАНСПОРТНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАПРУЖЕНИХ НАНОГЕТЕРОСИСТЕМ

1.1 Розподіл пружних деформацій та електронні стани в напружених наногетеросистемах з гладкою і негладкою гетеромежею квантова точка – матриця

У цьому параграфі приведено огляд задач, присвячених дослідженню впливу якості та геометрії деформованої гетеромежі, форми та розмірів квантових точок (КТ) на квантові стани носіїв заряду.

Електронна структура та оптичні властивості гетероструктур з квантовими точками визначаються формою, розміром КТ, розподілом механічних напружень, які виникають в результаті неспівпадіння параметрів граток між КТ і матричним елементом. Невідповідність сталих граток КТ та матриці приводить до утворення інтерфейсних дефектів, які можуть істотно вплинути на електронні властивості систем з КТ і, отже, на роботу електронних та оптоелектронних пристроїв на їхній основі. Зокрема, у роботі [5] було вивчено вплив дефектних станів інтерфейсу на провідність та фотопровідність гетероструктур $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ з квантовими точками $In_xGa_{1-x}As$ різної концентрації In/Ga. Проведено порівняння фотоелектричних властивостей зразків з різною концентрацією дефектів *x* індію у структурі $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ та досліджено властивості латерального фотоструму у гетероструктурах з ланцюгами квантових точок з різною концентрацією In *x*. Показано, що при зона-зонному збудженні КТ квантами $h\nu = 1.2\,\text{еВ}$ має місце довготривала динаміка наростання та релаксації фотоструму, а також ефект залишкової провідності після вимкнення збуджувального випромінювання.

Існують два основні підходи до опису пружної деформації твердих тіл: макроскопічний і мікроскопічний. Макроскопічний підхід, або наближення суцільного середовища, оперує величинами, усередненими за масштабом, великим в порівнянні із сталою гратки і полягає у використанні рівнянь теорії пружності [6]. Ці усереднені величини (вектор зміщення, тензор деформації та ін.) розглядаються як неперервні функції координат. Мікроскопічні ж моделі, навпаки, оперують величинами, пов'язаними з конкретними атомами.

Для аналізу розподілу деформацій у квантових точках застосовуються як метод скінченних різниць, так і метод скінченних елементів. Обидва ці методи перетворюють систему диференціальних рівнянь в скінченну систему лінійних рівнянь. Для чисельного розв’язання такої системи, як правило, використовується алгоритм спряженого градієнта (conjugate gradient algorithm).

В подальшому отримав розвиток аналітичний метод знаходження розподілу деформації, який базується на використанні функції Гріна [7–11] (тензора Гріна) основної задачі теорії пружності. Виявилося, що використовуючи деякі спрощені припущення (ізотропність пружних властивостей середовища, рівність модулів пружності матеріалу матриці і матеріалу включення) можна отримати аналітичний вираз для деформації в нескінченному кристалі, що містить включення у вигляді піраміди [8]. Такий розв'язок вдалося знайти, розглядаючи вектор зміщення пружного середовища у вигляді згортки тензора Гріна з деякою допоміжною функцією.

Автори робіт [10,11] поширили метод функцій Гріна у квантових точках у випадку анізотропних середовищ. Так, у роботі [10] проаналізовано вплив анізотропії кристала на пружну деформацію в модельній структурі з квантовою точкою у вигляді паралелепіпеда на основі наближеного виразу для тензора Гріна.

Вплив форми квантової точки на розподіл деформацій в контактуючих матеріалах КТ-структури та межі застосування ізотропного наближення для КТ-структур досліджено в роботі [11].

Тензор Гріна, який визначає зміщення атомів контактуючих ґраток, для нескінченних анізотропних пружних середовищ шукається з розв'язку рівняння:

$$\lambda_{iklm}\frac{\partial G_{ln}(\vec{r})}{\partial x_k \partial x_m} = -\delta(\vec{r})\delta_{in} \qquad (1.1)$$

з граничною умовою $G_{ln}(\vec{r}) \to 0$ при $|\vec{r}| \to \infty$, де λ_{iklm} – тензор пружних сталих, $\vec{r} = (x_1, x_2, x_3)$ – просторова координата. Застосовується правило сумування по 1, 2, 3 для індексів, що повторюються, до тих пір, поки сума не буде визначена точно. В обчисленнях приймалося, що тензор Гріна є однаковий для матеріалу матриці і КТ. Дослідження деформації матеріалу КТ-структури проводилось без врахування пружної взаємодії між КТ та впливу кривизни поверхні КТ на розподіл деформацій поблизу межі розділу КТ – матриця.

Простий метод для обчислення поля деформацій матеріалу відокремленої ізотропної КТ в наближенні пружного континууму з використанням функції Гріна розглянутий в роботі [12].

Авторами роботи [12] в межах лінійної теорії пружності теоретично досліджено вплив полів внутрішніх пружних напружень, спричинених неузгодженням параметрів кристалічних ґраток $a^{(1)}$ і $a^{(2)}$ квантової точки InAs та оточуючої матриці GaAs ($f = \left(a^{(1)} - a^{(2)}\right)/a^{(1)}$) на ширину забороненої зони InAs. При розв'язуванні задачі [12] поле зміщень атомів в матеріалах КТ з гладкою сферичною поверхнею радіусом R_0 та оточуючої матриці визначались тільки радіальною компонентою, яка залежить від радіальної координати r:

$$u_r^{(1)} = -\frac{2(1-2\nu)}{(1+\nu)}\frac{C}{R_0^3}r, \quad u_r^{(2)} = \frac{C}{r^2}, \tag{1.2}$$

де ν – коефіцієнт Пуассона.

Постійна C визначається з граничної умови $4\pi R_0^2\left(u_r^{(2)} - u_r^{(1)}\right)_{|r=R_0} = \Delta V$ і дорівнює $C = \frac{1+\nu}{3(1-\nu)}R_0^3 f$. Зміна об'єму сферичної квантової точки ΔV під впливом деформації стиску її кристалічної ґратки дорівнює $\Delta V = 4\pi R_0^3 f$.

Компоненти тензора деформацій (в сферичній системі координат) визначались через поле зміщень (1.2):

$$\varepsilon_{rr}^{(1)} = \varepsilon_{\varphi\varphi}^{(1)} = \varepsilon_{\theta\theta}^{(1)} = -\frac{2(1-2\nu)}{3(1-\nu)} f, \tag{1.3}$$

$$\varepsilon_{rr}^{(2)} = -\frac{2(1+\nu)}{3(1-\nu)}\frac{R_0^3}{r^3} f, \quad \varepsilon_{\varphi\varphi}^{(2)} = \varepsilon_{\theta\theta}^{(2)} = \frac{1+\nu}{3(1-\nu)}\frac{R_0^3}{r^3} f. \tag{1.4}$$

Дилатація $\delta = \sum_k \varepsilon_{kk}$ в квантовій точці постійна $\delta^{(1)} = -\frac{2(1-2\nu)}{1-\nu} f$, а в матеріалі нескінченної матриці відсутня $\delta^{(2)} = 0$.

Поле пружних напружень σ_{ik} було знайдене із (1.3),(1.4) та закону Гука:

$$\sigma_{rr}^{(1)} = \sigma_{\varphi\varphi}^{(1)} = \sigma_{\theta\theta}^{(1)} = -\frac{2E}{3(1-\nu)} f, \ \sigma_{rr}^{(2)} = \frac{2E}{3(1-\nu)} f, \ \sigma_{\varphi\varphi}^{(1)} = \sigma_{\theta\theta}^{(1)} = -\frac{1}{2}\sigma_{rr}^{(2)}, \tag{1.5}$$

де E – модуль Юнга.

Тоді тиск $P = \frac{1}{3}\sum_k \sigma_{kk}$ в квантовій точці та оточуючій матриці відповідно дорівнює:

$$P^{(1)} = \frac{2E}{3(1-\nu)} f, \qquad P^{(2)} = 0. \tag{1.6}$$

Необхідно зазначити, що при розрахунку компонент тензора деформації в задачі [12] припускали, що розмір оточуючої квантову точку

матриці є нескінченно великим, а тим самим не враховували всебічну деформацію матриці. Крім цього, пружні модулі матеріалів квантової точки та матриці вважались однаковими.

З мікроскопічних методів опису деформації в структурах з квантовими точками найбільш часто застосовується модель поля валентних сил (valence force field (VFF) model) [13,14,15]. У цій моделі передбачається, що пружна енергія залежить тільки від положень атомних ядер, що утворюють гратку атомів, причому враховуються тільки взаємодії між сусідніми атомами в гратці. Так, у роботі [14] розвинуто методику розрахунку пружної деформації в когерентно напружених гетероструктурах в рамках моделі валентних сил з використанням функції Гріна «атомістичної» пружної моделі та досліджено просторовий розподіл пружних деформацій в гетеросистемі Ge/Si з квантовими точками Ge пірамідальної форми, розміщених в матриці Si.

Серед робіт, в яких деформація в квантових точках обчислюється на основі мікроскопічних методів, більшість використовує потенціал Кітінга [16–21]. Найбільш проста форма потенціалу взаємодії в моделі VFF (для решітки типу алмазу) була запропонована автором [16].

Експериментальні дослідженння механічних напруг в низькорозмірних гетероструктурах грунтуються на методиці комбінаційного розсіювання світла [22,23]. Проте, аналіз спектрів комбінаційного розсіювання дозволяє оцінити лише усереднені значення деформації і не дає інформації про їх розподіл всередині і поблизу острівців. Ефективним інструментом для дослідження наносистем є методи комп'ютерного моделювання з використанням методу скінченних елементів [24]. Зокрема, в роботі [24] на основі методу скінченних елементів з використанням рівнянь теорії пружності

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0, \tag{1.7}$$

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\left[\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{0kl}\right], \tag{1.8}$$

$$\varepsilon_{kl} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right), \tag{1.9}$$

розраховано розподіли пружних деформацій в кремнієвих гетероструктурах з квантовими точками германію, де $\sigma_{ij}, \varepsilon_{kl}$ та C_{ijkl} – тензори механічних напружень, пружних деформацій та модулів пружності відповідно, u_k – вектор пружних зміщень, $\varepsilon_{0kl} = \frac{a_s - a_i}{a_s}\delta_{kl}$ – початкові деформації, спричинені невідповідністю параметрів гратки матеріалу підкладки та квантової точки, a_s і a_i – сталі гратки матеріалу підкладки та КТ відповідно, δ_{kl} – символ Кронекера.

Пружні внутрішні напруження в КТ значною мірою впливають на спектр електронних та діркових станів, тому знання характеру поля деформацій в матеріалах КТ та матриці є необхідним для подальшого моделювання опто- і наноелектронних приладів.

Для опису спектру електронних та діркових станів використовують два підходи: мікроскопічний [25] та макроскопічний [26–33]. У мікроскопічному підході детально враховують молекулярно-атомарну структуру квантової точки. Розрахунок енергетичного спектру носіїв в КТ у цьому підході проводиться кластерним методом [34] або в наближенні сильного зв’язку [35–40], методом псевдопотенціалу [41–43] та в наближенні локальної густини [44]. Дана група теоретичних моделей розрахунку локалізованих електронних та діркових станів не дає можливості врахувати вплив зовнішнього середовища на енергетичний спектр носіїв.

Вплив гладкої напруженої гетеромежі квантова точка – матриця на енергетичний спектр носіїв заряду в напружених наногетеросистемах з КТ проведений у роботах [25–51].

У макроскопічному підході нехтують детальною структурою середовищ і базуються на використанні таких параметрів, як ефективні маси квазічастинок, діелектричні проникності складових елементів наносистеми та потенціалі квазічастинок у КТ відносно навколишнього середовища. У цьому підході розрахунок енергії локалізованих електронних та діркових станів у КТ базується на використанні характеристик зонного спектру та методу огинаючої хвильової функції (наближення ефективної маси [46]). Ця теоретична модель придатна для опису систем відносно великих розмірів ($R_0 \geq 5a$, де a – параметр ґратки), коли починає відігравати помітну роль фактор кристалічної будови. В такому підході на даний час відсутні розрахунки, які б самоузгоджено враховували вплив деформаційних ефектів в наногетеросистемах з напруженими квантовими точками.

Електронні властивості квантових точок вивчалися також відомим k-p методом в моделі з нескінченно високими [47] та скінченними [48] потенціальними бар'єрами.

Авторами [49] теоретично досліджено в рамках деформаційного потенціалу спектр носіїв заряду у КТ InAs, перенормований деформацією гетероструктури з сферичною КТ. Зокрема, енергетичний спектр $E_{nl}^{(e,h)}$ та хвильові функції електрона і дірки в досліджуваній системі знаходився з розв'язку рівняння Шредінгера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2}\frac{1}{m^{*(i)}}\Delta_r + U_{(e.h)}(r)\right)\psi_{\mathrm{nl}}^{(\mathrm{i})}(r,\theta,\varphi) = E_{nl}\psi_{\mathrm{nl}}^{(\mathrm{i})}(r,\theta,\varphi), \qquad i = \begin{cases} 1 \equiv InAs \\ 2 \equiv GaAs \end{cases}, \quad (1.10)$$

де $U_{(e.h)}(r)$ – потенціальна енергія електрона і дірки у напруженій гетеросистемі InAs/GaAs з сферичною квантовою точкою InAs:

$$U_{(e.h)}(r) = \begin{cases} 0, & 0 \leq r \leq R_0 \\ \Delta E_{c,\upsilon}(0) - \left|a_{c,\upsilon}^{(1)}\varepsilon^{(1)}\right| - \left|a_{c,\upsilon}^{(2)}\varepsilon^{(2)}\right|, & R_0 \leq r \leq R_1 \end{cases}, \qquad (1.11)$$

де $\Delta E_{c,\upsilon}(0)$ – глибина потенціальних ям для електрона і дірки в ненапруженій квантовій точці, $\varepsilon^{(i)} = Sp\varepsilon^{(i)}$, $a_c^{(i)}$, $a_\upsilon^{(i)}$ – константи гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності та валентної зони, відповідно.

Компоненти тензора деформації визначалися із рівняння рівноваги:

$$\vec{\nabla}\mathrm{div}\vec{u} = 0 \qquad (1.12)$$

з такими граничними умовами :

$$\begin{cases} 4\pi R_0^2\left(u_r^{(2)}\big|_{r=R_0} - u_r^{(1)}\big|_{r=R_0}\right) = \Delta V\ , \\ \sigma_{rr}^{(1)}\big|_{r=R_0} = \sigma_{rr}^{(2)}\big|_{r=R_0} - P_L, \qquad P_L = \dfrac{2\alpha}{R_0}, \\ \sigma_{rr}^{(2)}\big|_{r=R_1} = -\sigma_{ef}\left(N\text{-}1\right), \end{cases} \qquad (1.13)$$

де R_0 – радіус КТ , R_1 – радіус матриці, P_L – Лапласівський тиск, α – поверхнева енергія КТ (InAs), $\Delta V = f\,4\pi R_0^3$. Параметр f виражає неузгодження постійних ґраток $a^{(1)}$, $a^{(2)}$ в наноматеріалах InAs і GaAs, відповідно.

Механічні напруги $\sigma_{rr}^{(1)}$ та $\sigma_{rr}^{(2)}$ в матеріалах квантової точки та матриці дорівнюють:

$$\sigma_{rr}^{(i)} = \frac{E_i}{(1+\nu_i)(1-2\nu_i)}\left[(1-\nu_i)\varepsilon_{rr}^{(i)} + \nu_i\left(\varepsilon_{\varphi\varphi}^{(i)} + \varepsilon_{\theta\theta}^{(i)}\right)\right], \quad (1.14)$$

де ν_i, E_i – коефіцієнт Пуассона і модуль Юнга матеріалу КТ та оточуючої матриці.

Розв’язок рівняння (1.12) у випадку сферичних КТ має вигляд:

$$u_r^{(1)} = C_1 r + \frac{C_2}{r^2}, \qquad 0 \le r \le R_0 \qquad (1.15)$$

$$u_r^{(2)} = C_3 r + \frac{C_4}{r^2}, \qquad R_0 \le r \le R_1 \qquad (1.16)$$

Поле зміщень визначає наступні компоненти тензора деформації матеріалів КТ і оточуючої матриці:

$$\varepsilon_{rr}^{(1)} = \varepsilon_{\varphi\varphi}^{(1)} = \varepsilon_{\theta\theta}^{(1)} = C_1, \tag{1.17}$$

$$\varepsilon_{rr}^{(2)} = C_3 - \frac{2C_4}{r^3}, \qquad \varepsilon_{\varphi\varphi}^{(2)} = \varepsilon_{\theta\theta}^{(2)} = C_3 + \frac{C_4}{r^3}, \tag{1.18}$$

Експериментальні дослідження електронної структури самоорганізованих квантових точок InAs в матриці GaAs були проведені в роботах [50,51] на основі вольт-ємнісної спектроскопії, оскільки фотолюмінесцентна спектроскопія дає можливість визначити тільки енергію переходу між електронними та дірковими рівнями в КТ.

Актуальною проблемою в області наноструктур є дослідження локалізованих електронних та діркових станів у наногетеросистемах з КТ із негладкою гетеромежею квантова точка – матриця [1,4,52,53,57–62], оскільки наявність нерівної гетеромежі призводить до появи додаткового механізму розсіювання носіїв заряду на шороховатостях поверхні [4,52,53], яке приводить до змін локалізованих електронних та діркових станів.

У роботі [53] теоретично досліджено квантово-електронні стани частинки, рух якої обмежено в одному напрямку нерівною стінкою, що представляє собою нескінченно високий потенціальний бар'єр. Показано, що, як у випадку періодично нерівної поверхні, так і у випадку шорохуватої поверхні при певних умовах виникають поверхневі стани, хвильові функції яких експоненційно зростають при віддаленні від стінки.

Теоретичне дослідження впливу геометрії поверхні КТ та деформаційного стану гетеромежі квантова – точка матриця пов'язане з проблемою знаходження розв’язку задачі про квантові стани системи, що перебувають в потенційній ямі довільної просторової форми та задачею про деформацію матеріалу КТ і матриці. Зокрема, в роботі [1] запропоновано функціональний метод теорії збурення форми поверхні наносфери та проаналізовано вплив спотворення форми сферичного нанооб'єкта на квантові стани носіїв заряду в ньому. Цей метод, на відміну від інших [54–56]

базується на розвиненні квантових величин у функціональний ряд по варіації форми поверхні нанооб'єкта, а не енергії.

Функціонал енергії квантово-розмірних станів $E[S(r)]$ представляється в наступному вигляді:

$$E[S(r)] = E[S_0(r)] + \int_V \frac{\delta E[S(r)]}{\delta S(\xi)}\Big|_{S=S_0} \delta S(\xi) d\xi + \\ + \frac{1}{2!}\iint_V \frac{\delta^2 E[S(r)]}{\delta S(\xi_1)\delta S(\xi_2)}\Big|_{S=S_0} \delta S(\xi_1)\delta S(\xi_2) d\xi_1 d\xi_2 + \ldots, \quad (1.19)$$

де $V-$ об'єм нанооб'єкта, $\frac{\delta}{\delta S(\xi)}-$ варіаційна похідна, $\delta S(\xi) = S(\xi) - S_0(\xi)-$ варіація поверхні нанооб'єкта.

Враховуючи тільки два члени ряду (1.19) і те, що варіаційна похідна $\frac{\delta E[S(r)]}{\delta S(\xi)} = \frac{dE[S(r)]}{dS(\xi)}\delta(r-\xi)$, функціонал енергії квантово-розмірних станів матиме вигляд:

$$E[S(r)] = E[S_0(r)] + \frac{dE[S(r)]}{dS(r)}\delta S(r). \quad (1.20)$$

У роботі [1] рівняння форми спотвореної поверхні відокремленого сферичного нанооб’єкта (без наявності матриці, яка оточує нанооб’єкт) має вигляд:

$$R(\theta) = R_0\sqrt{1 + p^2\cos^{\gamma}(k\theta)}\ , \quad (1.21)$$

де $\gamma, k, p-$ параметри, від значень яких залежить величина і вид варіації сферичної форми. Необхідно зазначити, що рівняння форми спотвореної поверхні (1.21) сферичного нанооб′єкта включає тільки геометричну складову зміни форми сферичного нанооб′єкта без врахування неоднорідно-деформаційного стану на напруженій гетеромежі КТ– матриця.

Енергія квазічастинки в потенціальній ямі КТ із спотвореною поверхнею (1.21) визначалася у вигляді:

$$E_{nl}(\theta,\varphi) \approx E_{nl}^{0}\left[1-\frac{\delta R^{2}(\theta,\varphi)}{R_{0}^{2}}\right], \qquad (1.22)$$

де $\delta R^{2}(\theta,\varphi) = R^{2}(\theta,\varphi) - R_{0}^{2}$ – варіація форми поверхні, яка описує відхилення форми нанооб'єкта від сферичної.

Хвильові функції квазічастинки у відокремленій КТ із збуреною поверхнею знаходяться з використанням функцій Гріна:

$$\psi_{nlm}^{1}(\vec{r}) = \oint\iiint_{0}^{r} G(\vec{r},\vec{\rho})\frac{2m^{*}E_{nlm}^{1}}{\hbar^{2}}\psi_{nl}^{0}(\vec{\rho})d\vec{\rho}\,, \qquad (1.23)$$

де $E_{nlm}^{1} = E_{nl} - E_{nl}^{0}$ – поправка першого порядку малості для енергії.

Експериментальні дослідженя впливу якості гетеромежі, форми та розмірів КТ на електронні властивості наногетеросистем проведено в роботах [4,57–62]. Зокрема, найбільш прості і надійні способи оцінки якості гетеромежі базуються на основі аналізу зміни спектрів смуги фотолюмінесценції (ФЛ), зумовленої розупорядкуванням гетеромежі [61,62] та на основі вимірювання рухливості носіїв заряду в квантовій точці [60]. Недоліком оптичного методу є неможливість оцінити поздовжні розміри неоднорідностей на гетеромежі і основний тип розсіювання. Оцінити поздовжні розміри неоднорідностей на гетеромежі і тип розсіювання в наногетероструктурі можна шляхом аналізу спектрів циклотронного резонансу (ЦР) [4].

1.2. Деформаційно-дифузійний розподіл точкових дефектів в напружених наногетеросистемах

У цьому параграфі аналізується стан досліджень самоузгодженого деформаційно-дифузійного просторового перерозподілу точкових дефектів, параметра деформації кристалічної ґратки та ефектів самоорганізації дефектно-деформаційних структур в напружених наногетеросистемах.

Напруження в напівпровідникових матеріалах можуть виникати як за рахунок наявності власних точкових дефектів, так і домішок [63, 64–68]. Такі напруження суттєво впливають на процес дифузії домішок [65–68] і власних дефектів [69], що відображається на їх стаціонарному розподілі. Так, в роботі [68] проведено в лінійному наближенні теоретичне дослідження іонної імплантації з врахуванням ненульового об'єму імплантованих іонів на основі стаціонарного рівняння дифузії. Запропоновано модель "деформаційного втягування", в основу якої покладено потік домішок, модифікований деформаційними ефектами. У цій же роботі показано, що деформаційний потік протидіє дифузійному і, за певних умов, може його перевищувати.

У роботі [65] встановлено, що деформаційний потік переважатиме дифузійний при умові, коли відносна концентрація домішок

$$C > \frac{k_B T}{W} \frac{1-2\nu}{1-\nu} \frac{\rho}{r_1}, \tag{1.24}$$

де W – величина дифузійного бар'єра; k_B – стала Больцмана; T – температура; ν – коефіцієнт Пуассона; r_1 – характерний радіус дифузійного каналу; ρ – константа, яка входить у вираз для модельного потенціалу відштовхування між атомами: $U(r) \sim e^{-\frac{r}{\rho}}$.

Таким чином, чим менша температура, тим менше граничне значення концентрації, при перевищенні якого механізм "деформаційного втягування" домішок переважає над дифузією. Враховуючи, що W/kT для

напівпровідників становить ~50-60 і відношення $\frac{\rho}{r_1} = 0.2 - 0.3$, отримаємо, що гранична концентрація *C* змінюється в межах 0.1 – 0.3%.

Дифузійні процеси, які пов'язані із введенням домішок у напівпровідникову структуру відіграють важливу роль у технології виготовлення оптоелектронних приладів. Зокрема, відомо, що арсенід галію, вирощений методом молекулярно-пучкової епітаксії при низькій температурі, містить надлишок миш'яку [63,64]. Впровадження надлишкового миш'яку спричиняє тетрагональне спотворення ґратки матеріалу GaAs і генерацію в ньому точкових дефектів: міжвузлових атомів (As), вакансій (Ga) та антиструктурних дефектів (As_{Ga}), що, в свою чергу, призводить до їх просторового перерозподілу.

У роботі [63] експериментально досліджено залежності невідповідності параметра ґратки та концентрації точкових дефектів в епітаксійному шарі GaAs від співвідношення потоків миш'яку та галію $\frac{J_{As}}{J_{Ga}}$. Показано, що такі залежності носять немонотонний характер, а саме в інтервалі $1 < \frac{J_{As}}{J_{Ga}} < 5$ параметр ґратки та концентрація дефектів різко зростає, а за межею цього інтервалу $(\frac{J_{As}}{J_{Ga}} > 5)$ плавно зменшуються. Такі ефекти пояснюються утворенням кластерів миш'яку [63,64], які утворюються після відпалу напівпровідникового матеріалу GaAs. Утворення кластерів миш'яку супроводжується зменшенням деформації ґратки GaAs і зменшенням її параметра до величини характерної для стехіометричного арсеніду галію.

Напруження, зумовлені неузгодженням ґраток епітаксійного шару і підкладки, можуть бути пружними у випадку, коли товщина шару не перевищує певного критичного значення [70]. В іншому випадку відбувається утворення дислокацій невідповідності, що супроводжується

різким погіршенням як оптичних, так і електричних характеристик приладів. Однак, в шарах $In_xGa_{1-x}As$ з неузгодженням меншим за критичне при певних умовах спостерігається значний спад рухливості та інтенсивності фотолюмінісценції [70], що пов'язано із збільшенням числа точкових дефектів та відповідним збільшенням дифузійного бар'єру для атомів третьої групи.

У експериментальних роботах [71, 72] досліджено явище пасивації електрично-фотоактивних дефектів і домішок атомарним воднем в гетероструктурах GaAs/InGaAs з напруженими квантовими ямами. Однак, у зазначених роботах ефект пасивації виражений значно слабше. Однією з причин може бути здатність напружених гетерошарів затримувати дифузію дефектів і домішок [73]. Причому, залежно від знаку напружень, які створюються дефектами і домішками, вони повинні накопичуватися в матеріалі бар'єру або квантової ями. Зокрема, в експериментальній роботі [74] показано, що напружені квантово-розмірні гетерошари затримують дифузію водню і дефектів в об'єм, що призводить до істотної відмінності просторового розподілу і процесів утворення рекомбінаційно активних і пасивованих комплексів в гетероструктурі та однорідних шарах.

Опромінення напівпровідникових структур нейтронами, α-частинками, γ-квантами, а також лазерним пучком призводить до виникнення точкових дефектів – міжвузлових атомів та вакансій [75–78]. Тому, при конструюванні приладів мікро- та оптоелектроніки, які експлуатуються в умовах дії різних радіаційних факторів та прогнозуванні їх радіаційної стійкості важливою задачею є вивчення причин зміни їх властивостей під впливом опромінення [79–81]. У роботі [82] побудована модель утворення надгратки антиструктурних дефектів під дією ядерного опромінення. В результаті відмінності розмірів атомів різного сорту навколо антиструктурного дефекту створюється пружне поле, яке призводить до взаємодії між дефектами. При значній концентрації антиструктурних дефектів кристал стає нестійким

відносно просторово-однорідного розподілу. Така нестійкість призводить до періодичної модуляції густини антиструктурних дефектів.

Взаємодія потужних лазерних імпульсів з поверхнею твердих тіл (металів, напівпровідників і полімерів) приводить до утворення періодичних структур рельєфу поверхні, які зберігаються після закінчення дії імпульсу [76,77,83–88]. Такі структури були ідентифіковані в [83,84] як новий клас індукованих дефектно-деформаційних (ДД) структур, а нестійкості, в результаті яких вони утворюються названі генераційно-дифузійно-деформаційними нестійкостями (ГДДН) [85].

В основі математичної моделі розвитку деформаційно-дифузійних нестійкостей лежить фізична модель пружно анізотропної плівки на субстраті [83].

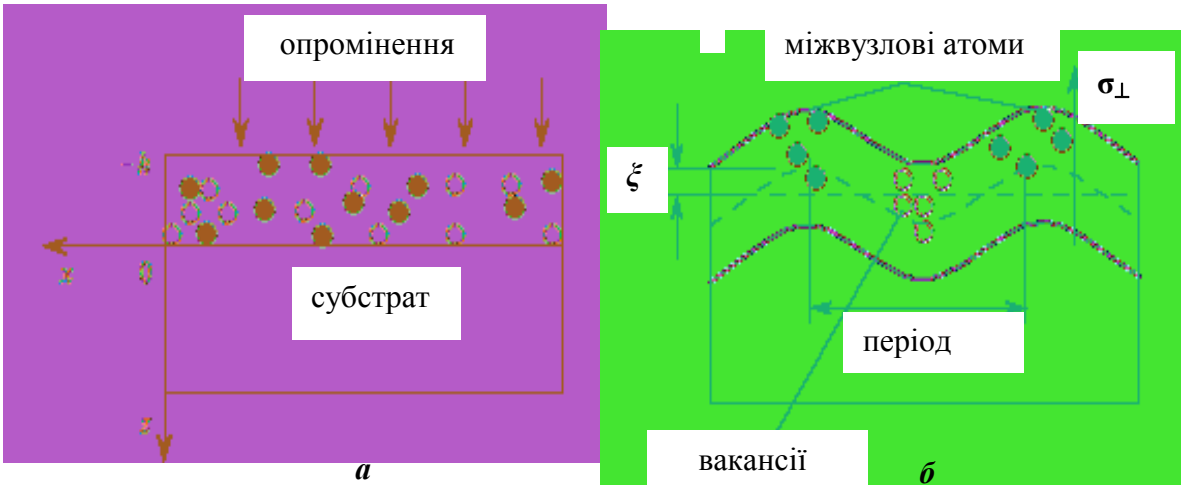

Рис.1.1. Модель плівки на субстраті:

а – вихідний стан: „плівка” недеформована;

б – деформована плівка при деформаційно-дифузійній нестійкості

У моделі [83] дефектно-збагачений шар товщиною h розглядається як “плівка” з густиною ρ і модулем Юнга E, жорстко з’єднана з субстратом, під яким розуміють решту частини кристала з параметрами пружності ρ_s і E_s. Площина з’єднання плівки із субстратом $z = 0$ паралельна поверхні (100),

при цьому вісь z напрямлена в глибину кристалу (рис.1.1), а осі x та y – вздовж двох ортогональних кристалографічних напрямків типу [89]. Рис.1.1а відповідає стану, коли дефекти рівномірно розподілені вздовж поверхні плівки. На рис.1.1б показана плівка при ДД нестійкості (плівка періодично вигнута, дефекти виду центру розтягу зібрані в областях максимальної деформації розтягу, а дефекти виду центру стиску – в областях максимальної деформації стиску).

Експериментальні результати роботи [90] були використані в [91] для апробації теорії нанометрової дефектно-деформаційної самоорганізації. Було отримано добре узгодження експериментальних даних та теоретичних розрахунків залежності періоду нанометрової ґратки від температури. Узгодження дефектно-деформаційної теорії і експерименту досягається при параметрі l_d / l_0 = 6, тобто довжина взаємодії дефектів з атомами структури є набагато більшою від довжини взаємодії атомів між собою. В роботах [91,92] знайдені умови утворення дефектно-деформаційних структур і визначені їх характеристики: розміри і форми кластерів, період періодичної структури, просторовий розподіл деформації і концентрації дефектів в об’ємному матеріалі з дефектно-деформаційними структурами без врахування електрон-деформаційної взаємодії.

У вище згаданих роботах, розрахунки концентрації домішок та параметра всебічної деформації проводились в лінійному наближенні без врахування ангармонічних доданків, які можуть бути значними при великій концентрації дефектів, та без врахування самоузгодженого зв’язку електронної системи із ансамблем дефектів.

У просторовому перерозподілі точкових дефектів та домішок у напівпровідниковому матеріалі значну роль відіграє їх взаємодія з електронною підсистемою [93–95]. Ця взаємодія проявляється в перерозподілі домішок по зарядовим станам, у зміні концентрації дефектів та в наявності внутрішнього електричного поля, яке створюється нерівномірно

розподіленими домішковими іонами і носіями – електронами і дірками [94,95]. Ці ефекти особливо проявляються, коли концентрація домішок значно перевищує концентрацію власних носіїв струму [93]. У випадку однієї домішки, яка дифундує у власний напівпровідник, таке поле прискорює міграцію. При цьому має місце збільшення коефіцієнта дифузії при збільшенні концентрації домішок.

У роботі [63] досліджувалась залежність відносної зміни параметра ґратки та концентрації точкових дефектів напівпровідникового матеріалу GaAs легованого та нелегованого домішками кремнію від відношення потоків миш'яку та галію $\frac{J_{As}}{J_{Ga}}$. Показано, що легування кремнію призводить до зменшення параметра ґратки та концентрації дефектів. В цій же роботі досліджувалась кореляційна залежність концентрації електронів легованого кремнієм напівпровідникового GaAs від середньої концентрації точкових дефектів (надлишкового миш'яку). Було встановлено, що при збільшенні концентрації дефектів на порядок, концентрація електронів зменшується на чотири порядки. Це дає змогу зробити висновок, що існує зв'язок між деформаційно-дефектною та електронною системами, що призводить до зміни електрофізичних параметрів напівпровідникового матеріалу.

В роботах [96–98] розвинуто метод розрахунку електрон-деформаційного потенціалу ізовалентної, неізовалентної домішок та плоского дефекту в залежності від ефективного радіусу домішок, ширини перехідної області плоского дефекту та ступеня заповнення зони провідності ($0 \le \bar{n} \le 2$), який залежить від складу компонент твердих розчинів. Зокрема, в роботах [96–99] запропоновано методику розрахунку електронного спектру у кристалічних системах з неузгодженими ґратками та досліджено залежність зміни параметра ґратки кристалу з точковими дефектами від ступеня заповнення електронами зони провідності, внесок електронної складової

деформації в роботу виходу електронів з неоднорідно деформованого кристалу, магнето-деформаційні ефекти у дефектній кристалічній ґратці.

Авторами робіт [97,100,101] було показано, що в результаті самоузгодженого електрон-деформаційного зв’язку механічні спотворення кристалічної матриці, спричинені дефектами, дислокаціями чи контактуючими областями гетероструктур, можуть істотно змінюватися.

У роботах [97,98] побудована мікроскопічна електрон-деформаційна модель напружених гетеросистем. В межах цієї моделі розглянуто механізм виникнення у напруженій надгратці локальних електрон-деформаційних ям, електрон-деформаційного диполя, розраховано спектр електрона та інтенсивність розсіяння Х-променів у напруженій надгратці з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії в залежності від концентрації носіїв та товщини нарощуваного шару (ширини квантової ями). Досліджено вплив перехідної області механічно-напруженої гетероструктури на електронний спектр і хвильові функції та електричного поля на напружений стан гетероструктури.

Неоднорідна деформація, зумовлена наявністю дефектів у гетероструктурах, внаслідок самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку призводить до локальної зміни ширини забороненої зони, і відповідно, до зміни потенціальної енергії носіїв струму. Так, авторами [102] отримано рівняння, які дозволяють розрахувати енергетичний спектр електрона в тришаровій гетеросистемі, що містить кластер точкових дефектів у квантовій ямі. Досліджено залежність різниці енергій електрона від середньої концентрації точкових дефектів виду центру розтягу при різних значеннях ефективної маси електрона у матеріалі нанокластера.

Авторами [2] досліджено стаціонарний просторовий розподіл електронів провідності в гетероструктурі $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs$ з напруженою квантовою ямою $In_xGa_{1-x}As$ в залежності від величини неузгодження параметрів ґраток контактуючих матеріалів з врахуванням

електрон-деформаційної взаємодії. У роботі [2] розглянуто випадок самоорганізації точкових дефектів в гетеросистемі, коли їх середня концентрація знаходиться в діапазоні $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$. Параметр всебічної деформації $U^{(i)}(x)$ матеріалів тришарової гетероструктури в такому випадку має вигляд:

$$U^{(i)}(x) = \frac{\theta_d^{(i)}}{K^{(i)}} N_{d0} + \text{sign}\theta_d^{(i)} \frac{A^{(i)}}{B^{(i)} + \text{ch}(\sqrt{a^{(i)}}\, x)} +$$

$$+ \begin{cases} 0, & i = 1, 3 \\ C_1(N_{d0}) e^{-\sqrt{a^{(2)}}x} + C_2(N_{d0}) e^{\sqrt{a^{(2)}}x} + \dfrac{\varepsilon_0 \dfrac{x^2}{a^2}}{1 - \dfrac{N_{d0}}{N_{dc}^{(2)}}} + b_1 x + b_0, & i = 2 \end{cases} \qquad (1.25)$$

При збільшенні середньої концентрації точкових дефектів в діапазоні $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$ область накопичення дефектів зміщується від центру внутрішнього шару InAs до його меж. При зменшенні ширини внутрішнього шару тришарової гетероструктури GaAs/InAs/GaAs від $400\,Å$ до $360\,Å$ спостерігається зменшення концентрації точкових дефектів та величини деформації розтягу в центрі такої структури на ~ 20% і, відповідно, незначне їх зростання у зовнішніх шарах .

1.3. Електричні властивості поверхнево-бар'єрних структур виду Шотткі

У цьому параграфі приведено огляд задач, присвячених дослідженню електричних властивостей поверхнево-бар'єрних структур виду Шотткі.

Останнім часом при побудові напівпровідникових приладів широкого використання набули контакти металу з напівпровідником з використанням проміжного нелегованого i-того шару [103–108].

У роботі [106] в дрейфово-дифузійному наближенні отримано самоузгоджений аналітичний розв'язок задачі про інжекцію носіїв струму в ізолюючий i-тий шар скінченної товщини для структур метал – i-тий шар – сильно легована напівпровідникова підкладка. Запропонований авторами підхід враховує як об'ємні ефекти, що пов'язані з обмеженням струму просторовим зарядом, так і контактні явища на межах напівпровідникового i-того шару. Отриманий розв'язок дозволяє розрахувати для структур метал – i-тий шар – сильно легована напівпровідникова підкладка вольт – амперну характеристику (ВАХ), яка описується функціональною залежністю густини струму $\hat{j}$ від прикладеної напруги V:

$$V = \frac{kT}{q}\cdot\frac{\varepsilon}{\varepsilon_s}\hat{E}(\hat{L}) + (\chi_0 + \Delta - \Delta_i)/q - \frac{kT}{q}\cdot 2\ln\left(\frac{Ai(y(0)) + C\cdot Bi(y(0))}{Ai(y(\hat{L})) + C\cdot Bi(y(\hat{L}))}\right), \quad (1.26)$$

$y(\hat{x}) = \left[\frac{\hat{j}}{2}\right]^{\frac{1}{3}}\left[\frac{A}{\hat{j}} - \hat{x}\right]$, A, C – сталі інтегрування, $\Delta = \Delta_i - q\varphi(0) - \chi(0) -$ висота потенціального бар'єру на межі напівпровідника з металом, $\Delta_i -$ розрив зон провідності на межі напівпровідників, $\chi(0) = \chi_0 - qV$, $\chi_0 = \frac{\hbar^2}{2m^*}(3\pi^2 n_s(x))^{\frac{2}{3}}$, $m^* -$ ефективна маса електрона, $q -$ заряд електрона, $n_s(x) -$ концентрація електронів, $\varphi(0) = \frac{KT}{q}(-2\ln(Ai(y(0)) + CBi(y(0)) + C^*)$,

$\varepsilon-$ відносна діелектрична проникливість, ε_s- відносна діелектрична проникливість n^+- шару, $\widehat{E}(\widehat{L})-$ напруженість електричного поля на гетеромежі i-тий шар $-n^+$-підкладка. Теоретичні дослідження вольт-амперних характеристик у поверхнево-бар'єрних 2-D системах виду метал – $i-n^+$ (або p^+)– напівпровідник проведені авторами у рамках дрейфово-дифузійного наближення без наявності шару квантових точок в області просторового заряду та без врахування деформаційних ефектів [106].

У роботі [107] досліджено вплив пружних деформацій, що виникають як за рахунок невідповідності параметрів граток контактуючих напівпровідникових матеріалів, так і в околі кластера дефектів міжвузловинного кадмію у легованій напівпровідниковій підкладці CdTe на інжекцію електронів в ізолюючий i-тий шар структури метал – нелегований напівпровідник $Zn_xCd_{1-x}Te$ – напівпровідникова підкладка n- CdTe.

Струмопереніс в основному визначається параметрами потенціального бар'єру Шотткі в напівпровіднику поблизу межі з металом. Зокрема для арсеніду галію, з середньою концентрацією електронів ($n_0 \le 10^{18} см^{-3}$) висота бар´єру Шотткі знаходиться в межах 0.6еВ–1.0еВ для більш ніж 40 розповсюджених металів. Одним із ефективних способів зміни висоти бар'єру є δ-легування [108] при якому висота бар'єру набуває значень 0.2еВ – 0.25еВ, а коефіцієнт неідеальності $n < 1.5$. Важливим є те, що значення поверхневої концентрації заряджених донорів N_d^+ (наприклад, Si) в δ-шарі GaAs можуть перевищувати $10^{13} см^{-2}$. При цьому зниження висоти бар'єру на 0.6еВ–0.8еВ забезпечується за умови, якщо площина δ-легування знаходиться від границі металу на відстанях $L_d = 30\text{Å} - 60\text{Å}$.

Явище зміни висоти бар'єру Шотткі в цьому випадку близьке за механізмом до того що, відбувається за наявності поверхневих станів на межі метал – напівпровідник [109]. Однак, якщо в останньому випадку густина

локальних рівнів і їх енергетичний спектр визначається якістю границі і практично не контролюється, тоді як параметри при сучасному рівні нанотехнологій легко піддаються контролю, що дозволяють ефективно керувати електричними характеристиками приладів.

Змінювати висоту бар'єру та електричні характеристики діодів Шотткі, крім легуванням, можна введенням шару КТ у контактуючий з металом напівпровідник [3]. В експериментальній роботі [110] введення квантових точок InAs у квантову яму GaAs поблизу границь гетероструктури AlAs/GaAs/AlAs приводить до збільшення на порядок дрейфової швидкості носіїв струму у вузьких квантових ямах GaAs. Це пов'язано з тим, що кожна квантова точка є відбивачем для оптичних фононів в GaAs.

У роботах [111,112] було досліджено для одновимірного випадку, без врахування деформаційних ефектів, розподіл електростатичного потенціалу $\varphi(x)$ в області просторового заряду в околі межі контакту метал – напівпровідник GaAs з шаром квантових точок InAs, вольт-фарадні характеристики [112] та розподіл потенціалу і процеси транспорту в кремнієвих діодах Шотткі, які містять масив нанокластерів германію [111].

Авторами роботи [112] розглянуто модель діода Шотткі тільки з одним шаром квантових точок, розміщених на відстані L_{dot} від контакту з металом, як показано на рис.1.2.

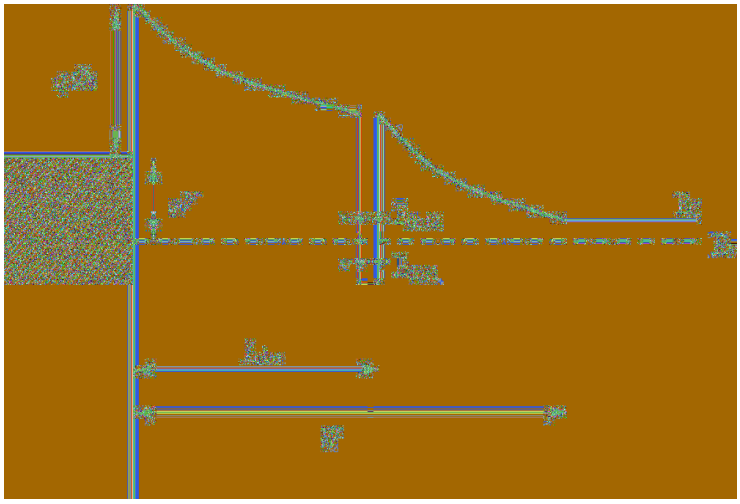

Рис.1.2. Профіль діода Шотткі з одиничним шаром квантових точок.

Розподіл потенціалу $\varphi(x)$ в барєрній структурі Шотткі з вбудованим шаром квантових точок у область просторового заряду визначався [112]:

$$\varphi(x) = -\frac{eN_d}{\varepsilon\varepsilon_0}(x-w)^2 + \begin{cases} 0, & x > L_{dot} \\ \frac{en_{dot}}{\varepsilon\varepsilon_0}(L_{dot}-x), & x < L_{dot}, \end{cases} \quad (1.27)$$

де N_d – густина заряду іонізованої домішки і n_{dot} – густина заряду в квантовій точці.

За наявності вбудованих в область просторового заряду КТ у бар'єрній структурі виду Шотткі, за певних технологічних параметрів можливе виникнення S-подібних вольт-амперних характеристик діодів Шотткі, що підтверджено експериментально [113].

Дослідження резонансного тунелювання електронів у двобар’єрній тунельно-резонансній структурі, вбудованій у бар’єр Шотткі проведено у роботі [114]. Для цього випадку обчислено й проаналізовано електронний коефіцієнт прозорості та вольт-амперну характеристику.

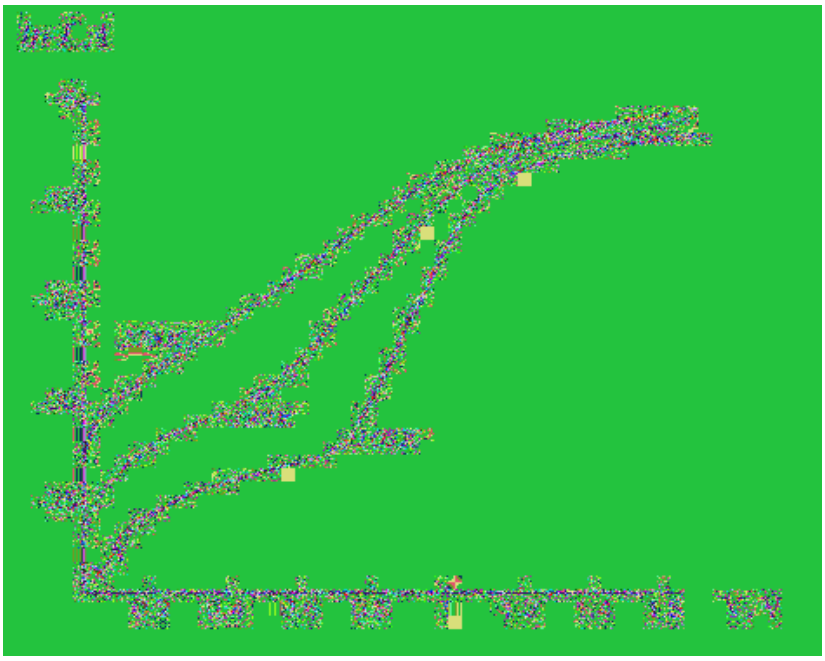

Рис. 1.3. Теоретична (суцільні лінії) і експериментальна (пунктирні лінії) залежність струму від напруги.

Як видно з рис.1.3, теоретичні розрахунки проведені в роботі [114] добре узгоджуються з даними експерименту.

У роботі [115] вивчено електричні та електролюмінесцентні властивості одиночної вузькозонної гетероструктури на основі p-n-переходу в арсеніді індію, що містить одиночний шар квантових точок InSb в матриці InAs. Наявність квантових точок істотно впливає на форму зворотньої вітки вольт-амперних характеристик гетероструктури.

Спектри поздовжньої фотопровідності та вольт-амперні характеристики фотопольової електронної емісії багатошарових гетероструктур Ge/Si з квантовими точками SiGe досліджувалися в роботі [116]. Електронну структуру досліджено за допомогою спектроскопії фотоструму при 77 *K* в діапазоні hv від 0.29eB до 1.0 eB. Спостерігався пік струму на кривій I–V фотопольової електронної емісії з квантових точок, який пов’язано з резонансним тунелюванням електронів із валентної зони Si у вакуум через рівні квантування у квантових точках. Внутрішньозонні переходи з локалізованих станів у валентній зоні нанооствівців Ge зумовлюють фотострум та фотопольову емісію електронів, спостережувані в гетероструктурах Si/Ge із квантовими точками.

Висновки до розділу

Виходячи з представленого огляду літератури можна зробити такі висновки:

1. Не повністю розкрите питання про вплив якості та геометрії деформованої гетеромежі на квантово-розмірні стани носіїв заряду в КТ, зокрема вплив як самоузгодженого електрон-деформаційного потенціалу сферичної квантової точки, взаємодіючої з матрицею, так і аксіально-симетричного збурення сферичної форми квантової точки, оточеної матрицею на квантово-механічні стани зарядів, локалізованих всередині деформованої квантової точки.
2. Відсутня теорія просторово-часового перерозподілу точкових дефектів у напівпровідникових напружених гетероструктурах в межах самоузгодженої деформаційно-дифузійної моделі. Побудова такої теоретичної моделі має науково-прикладне значення для прогнозованого керування фізичними параметрами: концентрацією дефектів у робочій області гетероструктури, концентрацією носіїв струму, рухливістю носіїв та електронною структурою рівнів у квантовій ямі наногетероструктури. Зокрема, дослідження впливу напружених гетеромеж на просторовий розподіл точкових дефектів може бути використане практично для очищення дефектів з епітаксій них шарів способом деформаційної дії.
3. Не з'ясованими залишаються питання про вплив вбудованого шару напружених КТ в область просторового заряду напівпровідника в залежності від розміщення шару КТ відносно контакту металу з напівпровідником на електричні властивості поверхнево-бар'єрних структур виду Шотткі та критеріїв виникнення S-подібних нестабільностей у вітках ВАХ діода Шотткі з вбудованим шаром квантових точок.

РОЗДІЛ 2
ВПЛИВ ГЕОМЕТРІЇ НАПРУЖЕНОЇ ГЕТЕРОМЕЖІ КВАНТОВА ТОЧКА-МАТРИЦЯ НА ЕЛЕКТРОННІ СТАНИ В КВАНТОВИХ ТОЧКАХ

2.1 Вступ

З сучасним розвитком нанотехнологій і фізики квантових наносистем виникає питання про вплив форми, розмірів квантових точок, що представляють собою область з трьохвимірним обмеженням об’єму [111,117,118], і геометрії гетеромежі на квантові стани як вільних, так і зв'язаних носіїв заряду.

Дослідження впливу якості та геометрії напруженої гетеромежі КТ – матриця на електронні властивості наногетеросистеми пов'язані із задачею про деформацію матеріалу КТ і матриці та проблемою знаходження розв’язку задачі про квантові стани системи, що перебувають в потенціальній ямі довільної просторової форми. У роботі [1] проаналізовано вплив поверхні ізольованої КТ з потенційною ямою з нескінченно високими стінками на квантові стани носіїв заряду без врахування матриці і деформації матеріалу квантової точки.

Енергетичний спектр просторово обмежених електронів і дірок розрахований у роботах [12,14,45,49] з врахування механічної складової деформації у межах прямокутного квантуючого потенціалу. Однак, у випадку когерентно-напружених КТ за наявності в їх околі полів пружних неоднорідних напруг і самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку крім механічної складової параметра деформації виникає додатково електронна складова деформації, яка суттєво проявляється у формуванні квантуючого потенціалу при значних концентраціях електронів провідності ($n_0 \le 10^{18} см^{-3}$) в матриці наногетеросистеми, що в кінцевому приводить до зміни положення енергетичних рівнів локалізованих у квантовій точці. Таким

чином, виникає необхідність побудови нової теоретичної моделі перенормування енергетичного спектра квантової точки під впливом самоузгодженої електрон-деформаційної взаємодії. Знаючи закономірність зміни електронної структури КТ в залежності від її розміру, середньої концентрації електронів провідності n_0 в матриці наногеторосистеми, геометрії гетеромежі КТ– матриця та поверхневої густини квантових точок N_{QD} можна прогнозовано керувати спектральними характеристиками нанооптоелектронних приладів на основі напружених наногетеросистем з КТ.

У цьому розділі досліджено вплив неоднорідно-деформованої гетеромежі з врахуванням самоузгодженого електрон-деформаційного зв’язку на електронні стани КТ та здійснено розвиток теорії збурення напруженої межі поділу "квантова точка – матриця", за допомогою якої досліджено вплив деформованої гетеромежі і аксіально-симетричного збурення форми сферичної КТ на квантово-механічні стани зарядів, локалізованих всередині неї.

У цьому розділі приведено результати розв′язку наступних задач:

- розрахунок профілю квантуючого потенціалу та енергетичного спектру електрона в наногетеросистемі з квантовими точками з врахуванням самоузгодженої електрон-деформаційної взаємодії;
- теоретичне дослідження впливу неоднорідно-деформованої гетеромежі КТ – матриця на квантові стани зарядів, які локалізовані в квантовій точці.

Результати цих досліджень представлені в роботах [119–124].

2.2 Модель самоузгодженої електрон-деформаційної взаємодії у напруженій наногетеросистемі з гладкою гетеромежею квантова точка – матриця

Розглядається наногетеросистема InAs/GaAs з напруженими впорядкованими квантовими точками InAs, які не мають чітко вираженої кристалографічної огранки, зокрема, квантові точки, форма яких наближено відображає сферичну симетрію. Наприклад, в гетеросистемі InAs/GaAs (001) такі КТ будуть формуватися при товщині нарощуваного шару InAs порядку 2 моношарів [125,126]. Тому в подальшому внеском ребер острівця в енергію пружної релаксації нехтуємо.

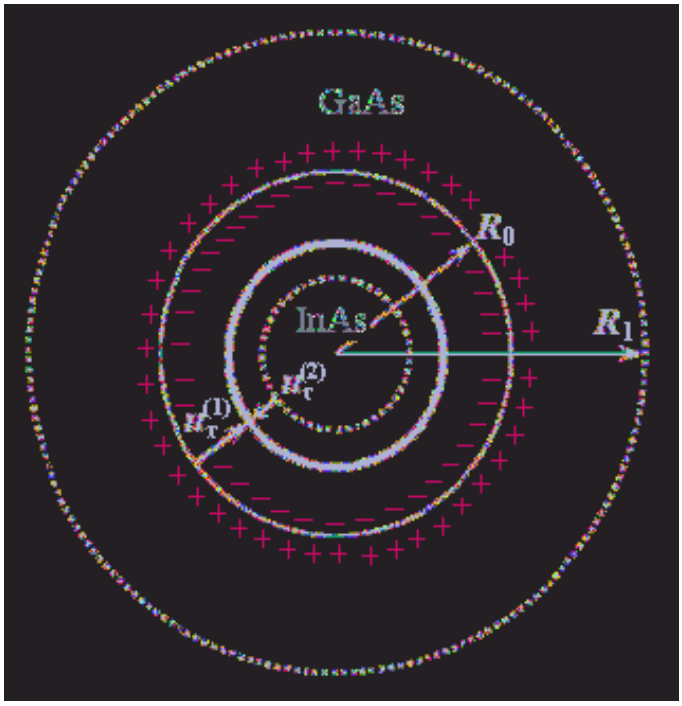

Рис.2.1. Геометрична модель гладкої напруженої гетеромежі КТ- матриця з врахуванням самоузгодженої електрон-деформаційної взаємодії.

Впорядковане розміщення напружених квантових точок у кристалічній матриці зумовлене пружною взаємодією між острівцями, яка виникає за рахунок неузгодження параметрів граток InAs/GaAs. Щоб звести задачу з великою кількістю КТ до задачі з однією КТ, зроблено наступне наближення: енергія попарної пружної взаємодії КТ замінена енергією взаємодії кожної КТ з усередненим полем пружної деформації $\sigma_{ef}(N-1)$ всіх інших КТ.

Оскільки постійна ґратки ($a^{(1)} = 6.08Å$) нарощуваного матеріалу InAs більша, ніж матриці GaAs ($a^{(2)} = 5.65Å$), то при гетероепітаксійному нарощуванні в межах псевдоморфного росту InAs на шар GaAs, матеріал InAs зазнає деформації стиску, а GaAs – розтягу. Формування напруженої сферичної наногетеросистеми здійснюється таким чином: сферична квантова точка радіусом R_0 представляється пружним дилатаційним мікровключенням у вигляді пружної сфери (суцільна тонка лінія на рис.2.1), поміщеним у сферичну порожнину у матриці GaAs (пунктирна лінія на рис.2.1), об'єм якої менший від об'єму мікровключення на ΔV. Щоб вкласти таке сферичне мікровключення, необхідно його стиснути $u_r^{(1)}$ ($u_r^{(1)}$ – радіальна компонента вектора механічного зміщення в матеріалі КТ) і розтягнути $u_r^{(2)}$ ($u_r^{(2)}$ – радіальна компонента вектора механічного зміщення в матеріалі матриці) оточуючу матрицю GaAs в радіальних напрямках. Результат одночасної дії деформацій контактуючих наноматеріалів описується зміною об'єму $\Delta V = f\,4\pi R_0^3$ через параметр невідповідності граток ($f = \frac{a^{(1)} - a^{(2)}}{a^{(1)}} \approx 7\%$) контактуючих матеріалів InAs/GaAs.

Під впливом неоднорідної деформації стиску матеріалу КТ (InAs) та неоднорідної деформації розтягу матеріалу матриці (GaAs) наногетеросистеми локально змінюється зонна структура напруженої наногетеросистеми з КТ. Така зміна, внаслідок самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку, приводить до перерозподілу електронів в околі напруженої межі квантова точка – матриця, а це в свою чергу до виникнення неоднорідного електростатичного потенціалу як в механічно напруженій КТ, так і в матриці, тобто до виникнення $n^+ -$ n-переходу (електрон-деформаційного диполя $P_{el.-def.}$)[127].

2.3 Розв'язок самоузгодженої системи рівнянь для деформації кристалічної гратки, електростатичного потенціалу та хвильових функцій електрона в полі деформаційного потенціалу наногетеросистеми

Профіль та глибина потенціальної ями для електрона в напруженій наногетеросистемі з КТ із врахуванням внесків електростатичної енергії $-e\phi^{(i)}(r)$ та енергії, зумовленої як механічною $\varepsilon_{mech}^{(i)}(r)$, так і електрон-деформаційною $\varepsilon_{el-def}^{(i)}(r)$ складовими деформацій матеріалів КТ та матриці, описується наступним співвідношенням:

$$\Delta V_c(r) = \Delta E_c(0) + a_c^{(2)}\left(\varepsilon_{mech}^{(2)}(r) + \varepsilon_{el-def}^{(2)}(r)\right) - a_c^{(1)}\left(\varepsilon_{mech}^{(1)}(r) + \varepsilon_{el-def}^{(1)}(r)\right) - e\left(\phi^{(2)}(r) - \phi^{(1)}(r)\right), \quad (2.1)$$

$$i = \begin{cases} 1 \equiv InAs, & 0 \le r \le R_0 \\ 2 \equiv GaAs, & R_0 \le r \le R_1 \end{cases},$$

де R_0 – радіус квантової точки, R_1 – радіус матриці, $\Delta E_c(0)$ – глибина потенціальної ями для електрона в КТ InAs в недеформованій гетероструктурі InAs/GaAs; $a_c^{(1)}$, $a_c^{(2)}$ – гідростатичні константи деформаційного потенціалу зони провідності в матеріалі квантової точки і матриці, $\varepsilon^{(i)}(r) = Sp\varepsilon_{mech}^{(i)}(r) + Sp\varepsilon_{el-def}^{(i)}(r)$ – параметр деформації i-того матеріалу наногетероструктури ($Sp\varepsilon_{mech}^{(i)}(r) = \varepsilon_{rrmech}^{(i)} + \varepsilon_{\varphi\varphi mech}^{(i)} + \varepsilon_{\theta\theta mech}^{(i)}$), який визначається через зміщення атомів $u_r^{(i)}$, які знаходяться з рівняння рівноваги, яке у випадку сферичної симетрії має вигляд:

$$\frac{d^2u_r^{(i)}}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{du_r^{(i)}}{dr} - \frac{2}{r^2}u_r^{(i)} = D^{(i)}e\frac{d\phi^{(i)}(r)}{dr} \quad (2.2)$$

з такими граничними умовами [12,128,129]:

$$\begin{cases} 4\pi R_0^2\left(u_r^{(2)}\big|_{r=R_0} - u_r^{(1)}\big|_{r=R_0} \right) = \Delta V, \\ \sigma_{rr}^{(1)}\big|_{r=R_0} = \sigma_{rr}^{(2)}\big|_{r=R_0} - P_L, \qquad P_L = \dfrac{2\alpha}{R_0}, \\ \sigma_{rr}^{(2)}\big|_{r=R_1} = -\sigma_{ef}\left(N\text{-}1\right), \end{cases} \tag{2.3}$$

(ліва частина першого з рівнянь системи (2.3) дорівнює геометричній різниці ΔV об'ємів мікровключення та порожнини в матриці GaAs, зображених на рис.2.1), $D^{(i)} = \dfrac{(1+\nu^{(i)})(1-2\nu^{(i)})}{(a^{(i)})^3 E^{(i)}(1-\nu^{(i)})}$, $u_r^{(i)}$ – радіальна компонента зміщення атомів в i-му напівпровідниковому матеріалі, $a^{(i)}$ – параметр гратки i-го матеріалу наногетероструктури, $\nu^{(i)}$, $E^{(i)}$ – коефіцієнт Пуассона і модуль Юнга матеріалу КТ та оточуючої матриці, e – заряд електрона, P_L – лапласівський тиск, $\alpha = \dfrac{2\int_0^{R1} \rho^{(i)}(c^{(i)})^2(\varepsilon^{(i)})^2(r) r^2 dr}{R_0 u_r^{(1)}(R_0)}$ – міжфазна поверхнева енергія InAs/GaAs [130], $c^{(i)}$ – поздовжня швидкість звуку в i-тому середовищі, $\rho^{(i)}$ – густина i-того середовища, $\sigma_{rr}^{(i)}$ – радіальні складові тензора механічного напруження i-го матеріалу .

Необхідно зазначити, що радіальна компонента вектора зміщення n-того атома $u_{r,n}^{(i)}$ у i-тому матеріалі визначається через радіальне поле зміщень $u_r^{(i)}$, знайдене в континуальному наближенні з рівняння (2.2) шляхом розвинення в ряд $u_{r,n}^{(i)} - u_0^{(i)} \approx \left(\vec{\rho}_n \vec{\nabla}\right) u_r^{(i)}(r)$ [131], де $\vec{\rho}_n$ – радіус вектор найближчих сусідів; $u_0^{(i)}$ – вектор зміщення центрального атома.

Загальний розв'язок неоднорідного рівняння (2.2) представляється у вигляді суми механічної та електрон-деформаційної складових зміщень:

$$u_r^{(i)}(r) = u_{rmech}^{(i)}(r) + u_{rel-def}^{(i)}(r), \tag{2.4}$$

де $u^{(i)}_{rmech}(r) = C_1^{(i)} r + \frac{C_2^{(i)}}{r^2}$, $u^{(i)}_{rel-def}(r) = \frac{D^{(i)} e}{r^2} \int r'^2 \phi^{(i)}(r') dr'$. (2.5)

Поле механічних зміщень визначають наступні компоненти тензора механічних деформації матеріалів КТ і оточуючої матриці:

$$\varepsilon^{(1)}_{rrmech} = \varepsilon^{(1)}_{\varphi\varphi mech} = \varepsilon^{(1)}_{\theta\theta mech} = C_1^{(1)}, \quad (2.6)$$

$$\varepsilon^{(2)}_{rrmech} = C_1^{(2)} - \frac{2C_2^{(2)}}{r^3}, \qquad \varepsilon^{(2)}_{\varphi\varphi mech} = \varepsilon^{(2)}_{\theta\theta mech} = C_1^{(2)} + \frac{C_2^{(2)}}{r^3}, \quad (2.7)$$

Коефіцієнти $C_1^{(1)}$, $C_1^{(2)}$, $C_2^{(2)}$ знаходяться з розв'язку системи (2.3) з врахуванням виразів (2.4) – (2.7), (2.12) та виразів для електростатичного потенціалу $\varphi^{(i)}(r)$ (2.20), (2.21).

Механічна складова всебічної деформації:

$$\varepsilon^{(i)}_{mech} = \varepsilon^{(i)}_{rrmech} + \varepsilon^{(i)}_{\varphi\varphi mech} + \varepsilon^{(i)}_{\theta\theta mech} = 3C_1^{(i)}. \quad (2.8)$$

Поле електрон-деформаційних зміщень описується такими компонентами тензора електронних деформацій:

$$\varepsilon^{(i)}_{rrel-def} = D^{(i)} e \left(\frac{2}{r^3} \int r'^2 \phi^{(i)}(r') dr' - \phi^{(i)}(r') \right), \quad (2.9)$$

$$\varepsilon^{(i)}_{\varphi\varphi el-def} = \varepsilon^{(i)}_{\theta\theta el-def} = D^{(i)} e \left(\frac{1}{r^3} \int r'^2 \phi^{(i)}(r') dr' \right). \quad (2.10)$$

Електрон-деформаційна складова всебічної деформації:

$$\varepsilon^{(i)}_{el-def} = \varepsilon^{(i)}_{rrel-def} + \varepsilon^{(i)}_{\varphi\varphi el-def} + \varepsilon^{(i)}_{\theta\theta el-def} = D^{(i)} e \varphi^{(i)}(r). \quad (2.11)$$

Механічні напруження $\sigma^{(1)}_{rr}$ та $\sigma^{(2)}_{rr}$ в матеріалах квантової точки та матриці дорівнюють:

$$\sigma^{(i)}_{rr} = \frac{E_i}{(1+\nu_i)(1-2\nu_i)} \left[(1-\nu_i) \varepsilon^{(i)}_{rr} + \nu_i \left(\varepsilon^{(i)}_{\varphi\varphi} + \varepsilon^{(i)}_{\theta\theta} \right) \right]. \quad (2.12)$$

Потенціал $\varphi^{(i)}(r)$ знаходиться з рівняння Пуассона

$$\Delta\varphi^{(i)}(\vec{r}) = \frac{e}{\varepsilon^{(i)}_d \varepsilon_0} \Delta n^{(i)}(\vec{r}), \quad (2.13)$$

де $\varepsilon_d^{(i)}$ – відносна діелектрична проникність і-того матеріалу наногетеросистеми, $\Delta n^{(i)}(\vec{r}) = (n^{(i)}(\vec{r}) - n_0)$ – зміна електронної густини в околі гетеромежі квантова точка матриця, яка визначається через суперпозицію добутку хвильових функцій:

$$n^{(i)}(\vec{r}) = \sum_n \frac{\psi_n^{*(i)}(\vec{r})\psi_n^{(i)}(\vec{r})}{\exp\left(\frac{E_n - \mu}{kT}\right) + 1}, \tag{2.14}$$

які знаходяться з рівняння Шредінгера (2.15):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^{*(i)}}\Delta_{\vec{r}} + \Delta V_c(\vec{r}) \right]\psi_{\text{n}}^{(\text{i})}(\vec{r}) = E_n \psi_{\text{n}}^{(\text{i})}(\vec{r}) \tag{2.15}$$

з граничними умовами:

$$\begin{cases} R_{nl}^{(1)}(r)_{|r=R_0} = R_{nl}^{(2)}(r)_{|r=R_0}; \\ \dfrac{1}{m^{*(1)}}\dfrac{dR_{nl}^{(1)}(r)}{dr}_{|r=R_0} = \dfrac{1}{m^{*(2)}}\dfrac{dR_{nl}^{(2)}(r)}{dr}_{|r=R_0} \end{cases}, \tag{2.16}$$

де $m^{*(i)}$ – ефективна маса електрона в i-му матеріалі КТ, E_n –енергія електрона на n-рівні в квантовій ямі, $\Delta V_c(\vec{r})$ – потенціальна енергія електрона (2.1), n_0, $n^{(i)}(\vec{r})$ – середня концентрація електронів провідності та концентрація носіїв заряду в напруженій наногетероструктурі з КТ, μ – хімічний потенціал наногетероструктури, що визначається з рівняння:

$$\frac{1}{\Omega_0}\int n(\vec{r})d\vec{r} = n_0, \tag{2.17}$$

де Ω_0 – об´єм елементарної комірки.

Розв’язок рівняння Шредінгера (2.15) в сферичній системі координат шукаємо у вигляді $\psi_{nlm}^{(i)}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}^{(i)}(r)\cdot Y_{lm}^{(i)}(\theta,\varphi)$, де $Y_{lm}^{(i)}(\theta,\varphi)$ – сферичні функції Лежандра.

Рівняння Пуассона (2.13), для сферичної симетрії запишеться у вигляді:

$$\frac{d^2\varphi^{(i)}}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d\varphi^{(i)}}{dr}=\frac{e}{\varepsilon_d^{(i)}\varepsilon_0}n^{(i)}(r)-n_0. \qquad (2.18)$$

Концентрація носіїв заряду в напруженій наногетероструктурі з КТ розраховувалась за формулою:

$$n^{(i)}(r)\approx\left|\psi_{nlm}^{(i)}\right|^2\frac{N_{QD}}{a_i}\times\left[erf\left(\frac{\sqrt{2}}{\Delta E}E_1\right)+erf\left(\frac{\sqrt{2}}{\Delta E}\left(\mu-E_1-\lambda_0^{(i)}-a_c^{(i)}\varepsilon_{rr}^{(i)}\right)\right)+\right.$$

$$\left.+\sqrt{\frac{8}{\pi}}\frac{e}{\Delta E}\exp\left(\frac{-2\left(\mu-E_1-\lambda_0^{(i)}-a_c^{(i)}\varepsilon_{rr}^{(i)}\right)^2}{\Delta E^2}\right)\varphi^{(i)}(r)\right. \qquad (2.19)$$

де N_{QD} – поверхнева густина квантових точок, ΔE – півширина гаусівської лінії, E_1– енергія електрона на першому локалізованому рівні в квантовій ямі.

Розв`язок рівняння Пуассона (2.18) в квантові точці та матриці, з врахуванням виразу для концентрації електронів (2.19) знаходився з усередненою густиною імовірності $\left|\overline{\psi}^{(i)}\right|^2$ і має наступний вигляд:

$$\varphi^{(1)}(r)=A_1\frac{\sinh\left(\sqrt{\frac{1}{a1}}\right)}{r}-a1b1,\qquad 0\le r\le R_0, \qquad (2.20)$$

$$\varphi^{(2)}(r)=B_1\frac{\exp\left(-\sqrt{\frac{1}{a2}}r\right)}{r}+B_2\frac{\exp\left(\sqrt{\frac{1}{a2}}r\right)}{r}-a2b2-\frac{d2}{2r}\times$$

$$\times\left[\exp\left(-\sqrt{\frac{1}{a2}}r\right)E_i\left(\sqrt{\frac{1}{a2}}r\right)+\exp\left(\sqrt{\frac{1}{a2}}r\right)E_i\left(-\sqrt{\frac{1}{a2}}r\right)\right],\ R_0\le r\le R_1, \qquad (2.21)$$

де $E_i(z)=\int_{-z}^{\infty}\frac{\exp(-t)}{t}dt$,

$$\frac{1}{a1}=\frac{e^2}{\varepsilon_d^{(1)}\varepsilon_0 a^{(1)}}\left|\overline{\psi}^{(1)}\right|^2 N_{QD}\frac{\sqrt{\frac{8}{\pi}}}{\Delta E}\times\exp\left(\frac{-2\left(\mu-E_1-\lambda_0^{(1)}-a_c^{(1)}C_1^{(1)}\right)^2}{\Delta E^2}\right),$$

$$\frac{1}{a2}=\frac{e^2}{\varepsilon_d^{(2)}\varepsilon_0 a^{(2)}}\left|\overline{\psi}^{(2)}\right|^2 N_{QD}\frac{\sqrt{\frac{8}{\pi}}}{\Delta E}\times\exp\left(\frac{-2\left(\mu-E_1-\lambda_0^{(2)}-a_c^{(2)}C_1^{(2)}\right)^2}{\Delta E^2}\right),$$

$$d2=\frac{2a_c^{(2)}C_2^{(2)}e}{\varepsilon_d^{(2)}\varepsilon_0 a^{(2)}}\left|\overline{\psi}^{(2)}\right|^2 N_{QD}\frac{\sqrt{\frac{8}{\pi}}}{\Delta E}\times\exp\left(\frac{-2\left(\mu-E_1-\lambda_0^{(2)}-a_c^{(2)}C_1^{(2)}\right)^2}{\Delta E^2}\right),$$

$$b1=\frac{e}{\varepsilon_d^{(1)}\varepsilon_0 a^{(1)}}\left|\overline{\psi}^{(1)}\right|^2 N_{QD}\left[erf\left(\frac{\sqrt{2}}{\Delta E}E_1\right)+erf\left(\frac{\sqrt{2}}{\Delta E}\left(\mu-E_1-\lambda_0^{(1)}-a_c^{(1)}C_1^{(1)}\right)\right)-\frac{a^{(1)}n_0}{\left|\overline{\psi}^{(1)}\right|^2 N_{QD}}\right],$$

$$b2=\frac{e}{\varepsilon_d^{(2)}\varepsilon_0 a^{(2)}}\left|\overline{\psi}^{(2)}\right|^2 N_{QD}\left[erf\left(\frac{\sqrt{2}}{\Delta E}E_1\right)+erf\left(\frac{\sqrt{2}}{\Delta E}\left(\mu-E_1-\lambda_0^{(2)}-a_c^{(2)}C_1^{(2)}\right)\right)-\frac{a^{(2)}n_0}{\left|\overline{\psi}^{(2)}\right|^2 N_{QD}}\right].$$

Коефіцієнти A_1, B_1, B_2 у виразах (2.20), (2.21) визначаються з умов неперервності потенціалів $\varphi^{(1)}(r)$ і $\varphi^{(2)}(r)$ на напруженій гетеромежі та нормальних складових векторів електричного зміщення і умови електронейтральності:

$$\begin{cases}\varphi^{(1)}(r)\big|_{r=R_0}=\varphi^{(2)}(r)\big|_{r=R_0}\\ \varepsilon^{(1)}\dfrac{\varphi^{(1)}(r)}{dr}\Big|_{r=R_0}=\varepsilon^{(2)}\dfrac{\varphi^{(2)}(r)}{dr}\Big|_{r=R_0}\\ \int\limits_0^{R_0} r^2\Delta n^{(1)}(r)dr+\int\limits_{R_0}^{R_1} r^2\Delta n^{(2)}(r)dr=0.\end{cases} \qquad (2.22)$$

Таким чином, підставивши отримані вирази для компонент тензора механічної та електронної складових деформацій (2.6) – (2.11) та вирази для електростатичного потенціалу (2.20), (2.21) у формулу (2.1) отримаємо вираз для квантуючого потенціалу електрона та дірки в напруженій наногетеросистемі з квантовими точками з врахуванням самоузгодженої електрон-деформаційної взаємодії.

2.4 Вплив електрон-деформаційної взаємодії на формування зонного профілю квантуючого потенціалу та на енергетичні рівні електрона у напруженій наногетеросистемі з КТ

Розрахунок глибини квантуючого скінченного потенціалу та енергетичного спектра електронів здійснювався на прикладі наногетеросистеми InAs/GaAs з такими параметрами [129]: $R_0 = 100\text{Å}$, $R_1 = 1000\text{Å}$, $a_c^{(1)} = -5.08eV$, $a_c^{(2)} = -7.17eV$, $a^{(1)} = 6.08\text{Å}$, $a^{(2)} = 5.65\text{Å}$, $m^{(1)} = 0.057m_0$, $m^{(2)} = 0.065m_0$, $n_0 = 10^{17}см^{-3} - 10^{18}см^{-3}$, $\Delta E_c(0) = 0.83eV$, $\alpha = 0.657H/м$. Відлік енергії як для потенціальної ями, так і для енергетичних рівнів ведеться від дна потенціальної ями електрон-деформаційного потенціалу.

На рис.2.2. представлені результати числового розрахунку глибини потенціальної ями $\Delta V_c(r)$ для електрона в напруженій КТ від її розмірів із врахуванням внесків електростатичної енергієї та енергії, зумовленої деформацією матеріалів КТ і матриці . Як бачимо, із збільшеням розміру R_0 КТ, глибина квантуючого потенціалу електрона як з врахуванням тільки механічної складової електрон-деформаційного потенціалу, так і з врахуванням електрон-деформаційного та електростатичного потенціалів монотонно зростає. Зокрема, при концентрації електронів провідності в матриці наногетеросистеми $n_0 = 10^{17}см^{-3}$ та поверхневій густині квантових точок $N_{QD} = 5.5 \cdot 10^{10}см^{-2}$, глибина потенціальної ями з врахуванням електрон-деформаційного та електростатичного потенціалів для $R_0 = 30\text{Å}$ та $R_0 = 100\text{Å}$ становить 0.652eB, 0.69eB відповідно, тоді як без врахування електростатичного потенціалу 0.67eB, 0.692 eB. Зменшення глибини квантуючого потенціалу (рис.2.2, суцільна лінія 2) зумовлене внеском електростатичної енергії та дією додаткового стиску матеріалу КТ, що

виникає за рахунок самоузгодженої електрон-деформаційної складової $\varepsilon_{el-def}^{(i)}(r)$ потенціалу, який залежить від розміру квантової точки R_0, ступеня заповнення зони провідності n_0 матриці та поверхневої густини N_{QD} КТ.

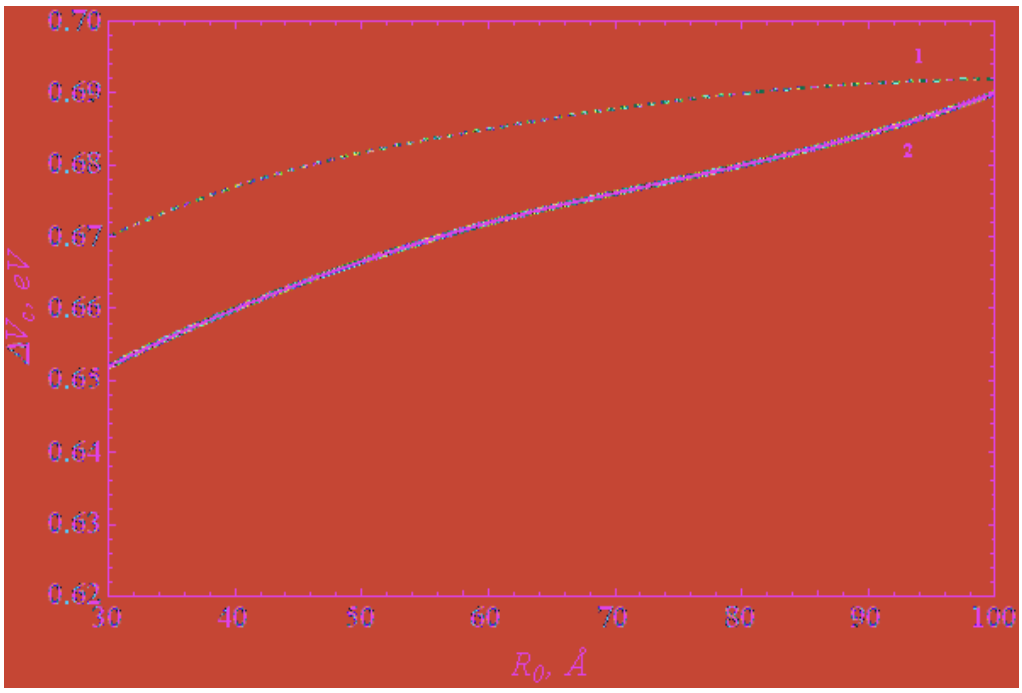

Рис.2.2. Залежність глибини потенціальної ями електронів у напруженій сферичній КТ від її радіуса R_0 при ($N_{QD} = 5.5 \cdot 10^{10} см^{-2}$, $n_0 = 10^{17} см^{-3}$):

1 (штрихова лінія) - з врахуванням тільки механічної складової електрон-деформаційного потенціалу; 2 (суцільна лінія) - з врахуванням як електрон-деформаційного, так і електростатичного потенціалів.

На рис. 2.3, 2.4 зображено профіль та глибину квантуючого потенціалу для електронів у наногетеросистемі InAs/GaAs з КТ InAs при різних значеннях концентрації електронів провідності ($n_0 = 10^{17} см^{-3}, n_0 = 10^{18} см^{-3}$) у матриці GaAs з поверхневою густиною КТ $N_{QD} = 5.5 \cdot 10^{10} см^{-2}$. Як видно з рис. 2.3, 2.4 електрон-деформаційна складова деформаційного потенціалу $\varepsilon_{el-def}^{(i)}(r)$ та електростатична енергія $-e\varphi^{(i)}(r)$ зумовлюють енергетичне

зміщення країв дозволених зон $\Delta E_c^{(i)} = a_c^{(i)}\varepsilon^{(i)} - e\varphi^{(i)}(r)$. Зокрема, при $R_0 = 100\text{Å}$, $n_0 = 10^{17}\,см^{-3}$, $N_{QD} = 5.5\cdot 10^{10}\,см^{-2}$ відбувається неоднорідне енергетичне зміщення (“випучування”) дна квантової ями в сторону більших енергій відносно деформованого дна зони провідності, зумовленого механічною деформацією матеріалу КТ ~ 45меВ та країв дозволених зон матриці в сторону менших енергій ~ 70меВ . Із збільшенням середньої концентрації електронів провідності на порядок ($n_0 = 10^{18}\,см^{-3}$) електрон-деформаційна складова деформації приводить до енергетичного пониження країв дозволених зон матриці на 130 меВ.

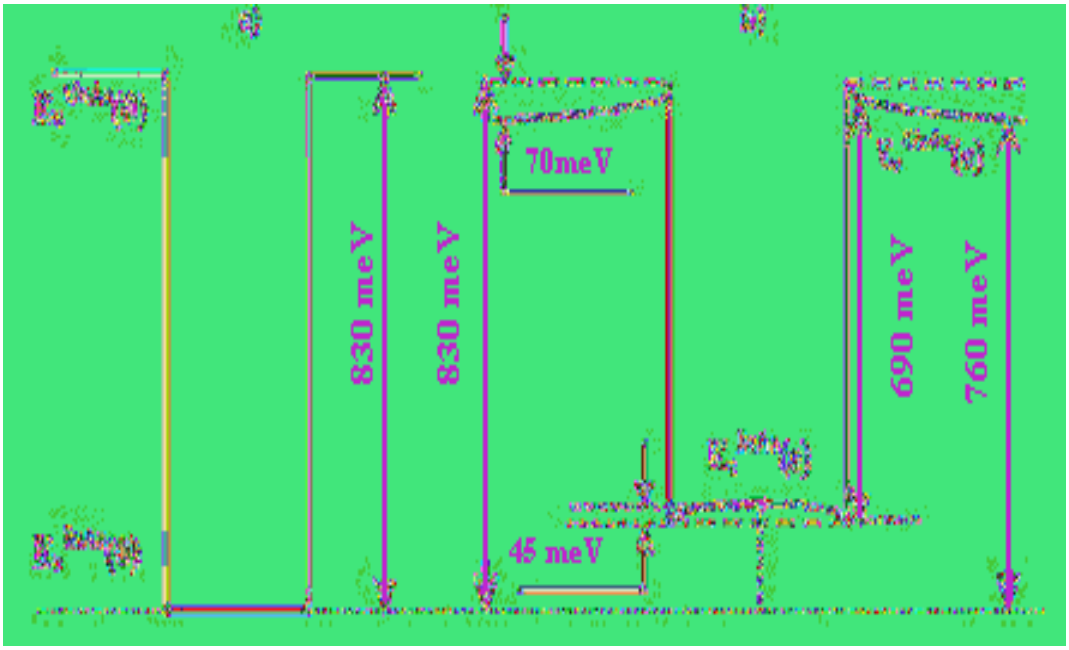

Рис.2.3. Профіль квантуючого потенціалу наногетеросистеми InAs/GaAs з квантовою точкою InAs радіусом $R_0 = 100\text{Å}$, $n_0 = 10^{17}\,см^{-3}$, що формується : тільки за рахунок розриву зон провідності $\Delta E_c(0)$ (a); за рахунок розриву зон провідності $\Delta E_c(0)$ та механічної складової деформаційного потенціалу (b, пунктирна лінія); за рахунок розриву зон провідності $\Delta E_c(0)$, механічної і електрон-деформаційної складових деформаційного потенціалу та внеску електростатичної енергії (b, суцільна лінія).

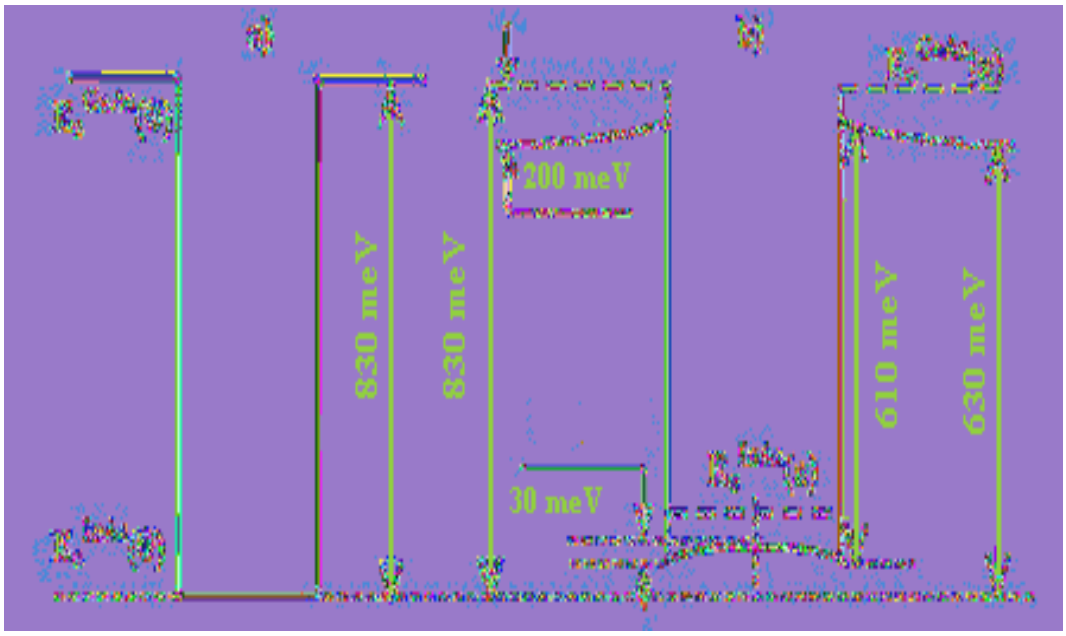

Рис.2.4. Профіль квантуючого потенціалу наногетеросистеми InAs/GaAs з квантовою точкою InAs радіусом $R_0 = 100\text{Å}$, $n_0 = 10^{18} см^{-3}$, що формується: тільки за рахунок розриву зон провідності $\Delta E_c(0)$ (a); за рахунок розриву зон провідності $\Delta E_c(0)$ та механічної складової деформаційного потенціалу (b, пунктирна лінія); за рахунок розриву зон провідності $\Delta E_c(0)$, механічної і електрон-деформаційної складових деформаційного потенціалу та внеску електростатичної енергії (b, суцільна лінія).

Енергетичні спектри електронів розраховувалися чисельним методом стрільби [141] на основі розв'язку рівняння Шредінгера (2.15) з квантуючим потенціалом (2.1), що формується як механічною, так і електронною складовими електрон-деформаційного потенціалу $a_c^{(i)}(\varepsilon_{mech}^{(i)}(r) + \varepsilon_{el-def}^{(i)}(r))$ та енергією електростатичної взаємодії зарядів $(-e\varphi^{(i)}(r))$ в околі межі КТ – матриця, яка виникає внаслідок перерозподілу електронів, зумовленого дією неоднорідної деформації матеріалів КТ- матриця .

На рис. 2.5 і 2.6 приведені результати числових розрахунків залежностей енергії електрона в основному і збудженому станах від розміру R_0 КТ InAs при $N_{QD} = 5.5 \cdot 10^{10} см^{-2}$, $n_0 = 10^{17} см^{-3}$.

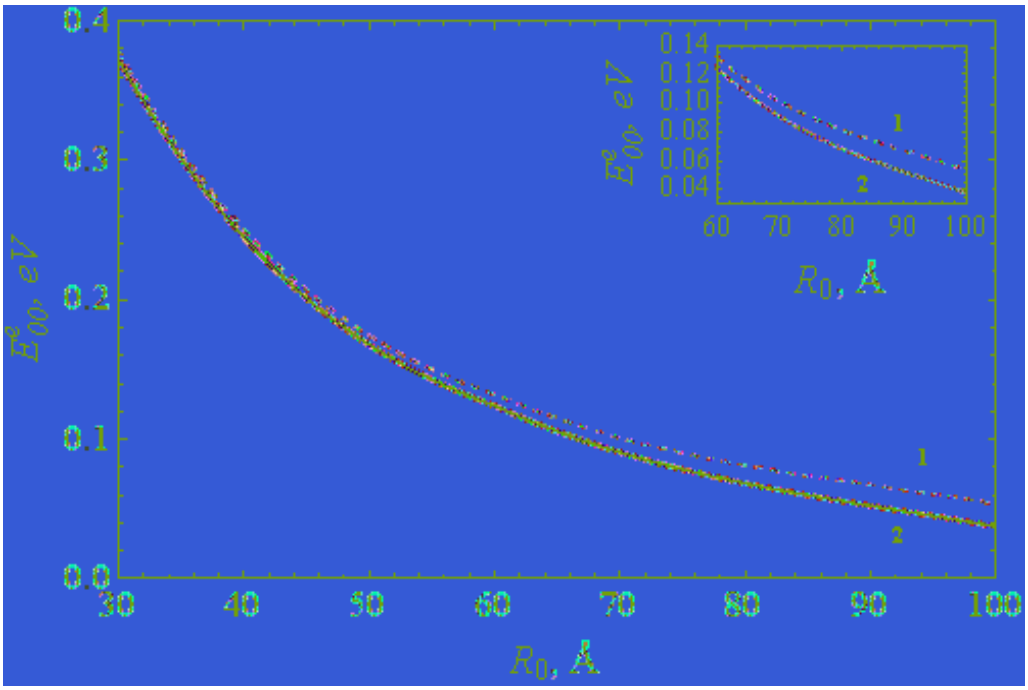

Рис.2.5. Залежність енергії основного стану електрона E^e_{00} від розміру КТ InAs ($N_{QD} = 5.5 \cdot 10^{10} см^{-2}$, $n_0 = 10^{17} см^{-3}$): штрихова лінія (1) – з врахуванням тільки механічної складової електрон-деформаційного потенціалу; суцільна лінія (2)–з врахуванням як електрон-деформаційного, так і електростатичного потенціалів.

Порівняння кривих 1 та 2 на рис. 2.5 і 2.6 показує, що електрон-деформаційна складова деформаційного потенціалу $\varepsilon^{(i)}_{el-def}(r)$ та електростатична енергія $-e\varphi^{(i)}(r)$ приводять до немонотонного пониження енергії основного та збудженого станів електрона в діапазоні розмірів КТ $30Å \le R_0 \le 100Å$ відносно енергії електрона розрахованого з врахуванням тільки механічної складової електрон-деформаційного потенціалу $\varepsilon^{(i)}_{mech}(r)$. Зокрема, пониження енергії основного та збудженого станів електрона менш

проявляється в діапазоні розмірів КТ $30Å \le R_0 \le 100Å$ (6 меВ) ніж у діапазоні $60Å \le R_0 \le 100Å$ (8-16 меВ).

Такий характер поведінки енергетичних рівнів електрона в КТ в залежності від її розміру R_0 можна пояснити таким чином: ріст R_0 зумовлює зменшення впливу поверхні (тиску Лапласа) і всесторонньої механічної деформації кристалічної гратки матеріалу КТ (КТ стає більш масивною), що приводить до збільшення глибини потенціальної ями, тоді як складова електростатичної енергії квантуючого потенціалу приводить до підняття (пониження) дна зони провідності в КТ при $n_0 = 10^{17} см^{-3}$ ($n_0 = 10^{18} см^{-3}$) відносно механічної складової електрон-деформаційного потенціалу відповідно (див.рис.2.3).

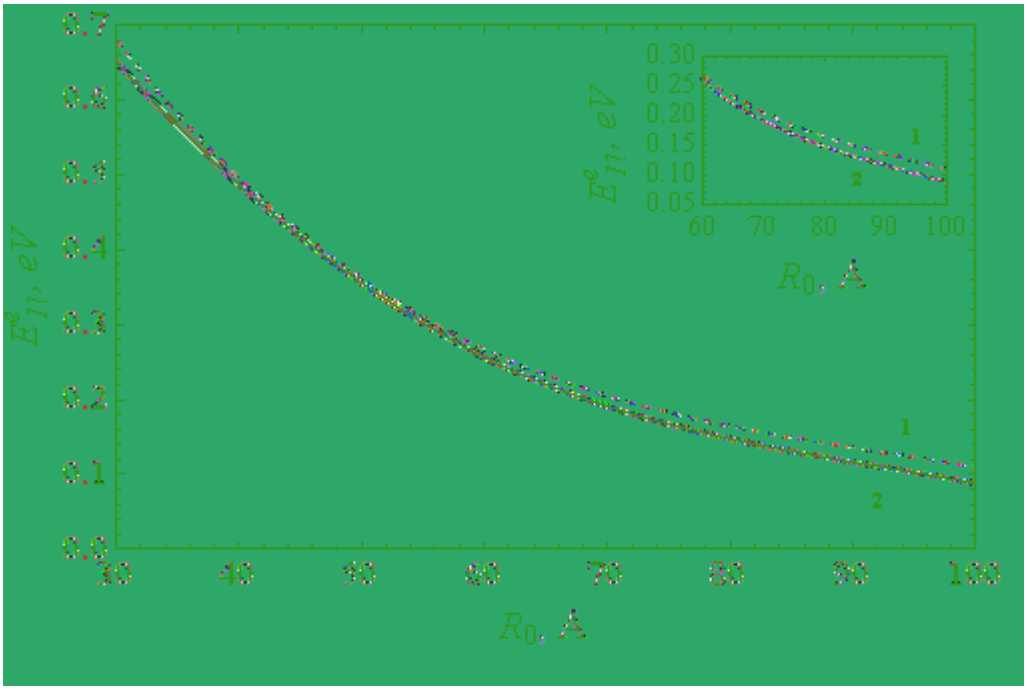

Рис.2.6. Залежність енергії збудженого стану від розміру сферичної КТ InAs ($N_{QD} = 5.5 \cdot 10^{10} см^{-2}$, $n_0 = 10^{17} см^{-3}$) електрона E_{11}^e; штрихова лінія (1) – з врахуванням тільки механічної складової деформаційного потенціалу; суцільна лінія (2) – з врахуванням як електрон-деформаційного, так і електростатичного потенціалів.

Із збільшенням середньої концентрації електронів провідності в матеріалі матриці на порядок ($n_0 = 10^{18} см^{-3}$) енергетичні рівні електрона в КТ із врахуванням сумарного електрон-деформаційного та електростатичного потенціалів підвищуються на 7 меВ для $R_0 = 100Å$, що пов'язане із збільшенням перерозподілу електронів у наногетеросистемі між КТ та матрицею .

Крім цього, збільшення поверхневої густини N_{QD} КТ в інтервалі $3 \cdot 10^{10} см^{-2} \le N_{QD} \le 5.5 \cdot 10^{10} см^{-2}$ при фіксованій середній концентрації електронів провідності $n_0 = 10^{17} см^{-3}$ у матриці GaAs, приводить до пониження енергетичних рівнів електрона в КТ, оскільки з ростом середньої концентрації електронів провідності електронна складова деформації збільшується, створюючи додатковий стиск матеріалу матриці і КТ, що приводить до зменшення глибини квантуючого потенціалу та пониження енергетичних рівнів електрона відповідно. Зокрема, при $R_0 = 100Å$, $N_{QD} = 3 \cdot 10^{10} см^{-2}$ енергія основного та збудженого станів електрона в КТ становить 44 меВ, 98 меВ, тоді як при $N_{QD} = 5.5 \cdot 10^{10} см^{-2}$ 37 меВ, 88 меВ відповідно.

Отже, знаючи закономірності зміни положення енергетичних рівнів у КТ перенормованих як електрон-деформаційним, так і електростатичним потенціалами, в залежності від її розміру R_0, середньої концентрації електронів провідності n_0 в матриці наногеторосистеми та поверхневої густини квантових точок N_{QD} можна прогнозовано керувати спектральними характеристиками нанооптоелектронних приладів (резонансно–тунельні діоди) на основі напружених наногетеросистем з КТ (InAs/GaAs з КТ (InAs).

2.5 Модель напруженої наногетеросистеми з неоднорідно-деформованою гетеромежею квантова точка – матриця

Розглядається гетеросистема InAs/GaAs з когерентно-напруженими КТ InAs із збуреною формою у вигляді аксіально-симетричної поверхні. Таке збуреннння зумовлено як флуктуацією товщини квантової ями, так і анізотропією сталих пружності матеріалів КТ і матриці. Збурення форми сферичного нанооб′єкта з врахуванням неоднорідно-деформованої гетерограниці описується рівнянням:

$$\tilde{R}(\theta) = R(\theta) + u_r^{(1)}(R(\theta), \theta), \qquad (2.22)$$

де $R(\theta) = R_0\sqrt{1 + p^2 \cos^{\gamma}(k\theta)}$; $\gamma, k, p -$ параметри, від значень яких залежить величина і вид варіації сферичної форми; $\theta -$ кут між радіусом-вектором, наведеним з початку координат до точки на поверхні і віссю Z (рис.2.7); $u_r^{(1)}(R(\theta), \theta)$ – радіальна компонента вектора зміщення атомів.

Щоб звести задачу з великою кількістю КТ до задачі з одною КТ, зроблено наступне наближення. Енергію попарної пружної взаємодії КТ замінено енергією взаємодії кожної КТ з усередненим полем пружної деформації $\sigma_{ef}(N-1)$ всіх інших КТ $(N-1)$. Оскільки постійна гратки матеріалу InAs більша, ніж матриці GaAs, то при гетероепітаксії в межах псевдоморфного росту InAs на GaAs матеріал InAs піддається деформації стиску, а GaAs – деформації розтягу. Тому неоднорідно-деформовану сферичну КТ можна представити пружним дилатаційним нановключенням з радіусом $R(\theta)$, поміщеним в порожнину матриці GaAs радіусом R_1. Об’єм порожнини менший від об’єму нанооб'єкта на ΔV.

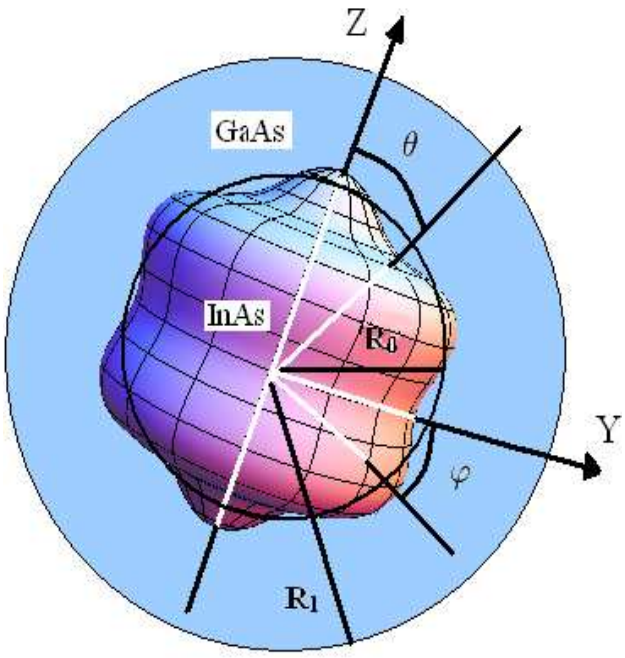

Рис.2.7. Геометрична модель неоднорідно-деформованої напруженої гетеромежі КТ – матриця

Для визначення компонент тензора деформації використо-вували рівняння рівноваги [129]

$$\vec{\nabla} div\vec{u} = 0 \qquad (2.23)$$

з граничними умовами:

$$\begin{cases} 4\pi R^2(\theta)\left(u_r^{(2)}\Big|_{r=R(\theta)} - u_r^{(1)}\Big|_{r=R(\theta)}\right) = \Delta V, \\ \sigma_{rr}^{(1)}\Big|_{r=R(\theta)} = \sigma_{rr}^{(2)}\Big|_{r=R(\theta)} - P_L, \quad P_L = \dfrac{2\alpha}{R_0}, \\ \sigma_{rr}^{(2)}\Big|_{r=R_1} = -\sigma_{ef}\,(N-1), \end{cases} \qquad (2.24)$$

де $u_r^{(i)}$ – радіальна компонента зміщення атомів в i-тому напівпровідниковому матеріалі, P_L – лапласівський тиск; α – міжфазна поверхнева енергія InAs/GaAs.

Різниця об’ємів пружного дилатаційного мікровключення і порожнини в матриці GaAs дорівнює $\Delta V = 4\pi R^3(\theta) f$, де $f = \dfrac{a^{(1)} - a^{(2)}}{a^{(1)}} \approx 7\%$ – параметр невідповідності постійних гратки матеріалів КТ (InAs) і матриці GaAs.

Розв’язок рівняння (2.23) має вигляд:

$$u_r^{(i)}(r,\theta) = C_1^{(i)}(\theta) r + \frac{C_2^{(i)}(\theta)}{r^2},\ i = \begin{cases} 1 \equiv InAs \\ 2 \equiv GaAs \end{cases} \qquad (2.25)$$

Поле зміщень визначають наступні компоненти тензора деформації:

$$\varepsilon_{rr}^{(1)}(r,\theta) = \varepsilon_{\varphi\varphi}^{(1)}(r,\theta) = \varepsilon_{\theta\theta}^{(1)}(r,\theta) = C_1^{(1)}(\theta), \qquad (2.26)$$

$$\varepsilon_{rr}^{(2)}(r,\theta) = C_1^{(2)}(\theta) - \frac{2C_2^{(2)}(\theta)}{r^3}, \qquad (2.27)$$

$$\varepsilon_{\varphi\varphi}^{(2)}(\mathrm{r},\theta) = \varepsilon_{\theta\theta}^{(2)}(\mathrm{r},\theta) = \mathrm{C}_1^{(2)}(\theta) + \frac{2\mathrm{C}_2^{(2)}(\theta)}{\mathrm{r}^3}. \qquad (2.28)$$

Механічні напруження в матеріалах квантової точки $\sigma_{rr}^{(1)}$ і матриці $\sigma_{rr}^{(2)}$ дорівнюють:

$$\sigma_{rr}^{(i)} = \frac{E_i}{\left(1+\nu^{(i)}\right)\left(1-2\nu^{(i)}\right)}\left[\left(1-\nu^{(i)}\right)\varepsilon_{rr}^{(i)}(r,\theta) + \nu^{(i)}\left(\varepsilon_{\varphi\varphi}^{(i)}(r,\theta) + \varepsilon_{\theta\theta}^{(i)}(r,\theta)\right)\right], \quad (2.29)$$

де $\nu^{(i)}$ – коефіцієнти Пуассона, E_i – модуль Юнга матеріалу КТ та оточуючої матриці. Коефіцієнти $C_1^{(1)}(\theta)$, $C_1^{(2)}(\theta)$, $C_2^{(2)}(\theta)$ знаходяться з розв'язку системи рівнянь (2.24) з урахуванням (2.25) – (2.29).

2.6 Спектр енергії носіїв заряду в наногетеросистемі з неоднорідно-деформованою гетеромежею квантова точка – матриця

У цьому параграфі розглядається задача про вплив деформованої форми сферичної КТ на енергетичний спектр носіїв заряду всередині цього нанооб′єкта, який знаходиться в матриці. Розв'язок цієї задачі виконувався в наближенні ефективної маси. Квантову точку з деформованою її поверхнею моделювали скінченною потенціальною ямою з формою поверхні $S(\varepsilon(\vec{r}))$. Форму потенціальної ями отримували способом варіювання незбуреної поверхні $S_0(\vec{r})$ КТ [1] з врахуванням рівняння механічної рівноваги (2.23).

Спектр енергії $E(\varepsilon^{(1)}(R_0,\theta),\varepsilon^{(2)}(R_0,\theta))$ квазічастинки в деформованій потенціальній ямі з аксіально-симетричним збуренням форми сферичної КТ, знаходився на основі функціонального методу збурення форми поверхні нанооб'єкта [1] з врахуванням неоднорідної деформації гетеромежі КТ–матриця

$$E(\varepsilon^{(1)}(R_0,\theta),\varepsilon^{(2)}(R_0,\theta)) \approx E_{nl}^0(\varepsilon^{(1)}(R_0),\varepsilon^{(2)}(R_0))\left[1-\frac{\delta\tilde{R}^2(\varepsilon^{(1)}(R_0,\theta))}{R_0^2}\right], \quad (2.30)$$

де $\delta\tilde{R}^2(\varepsilon^{(1)}(R_0,\theta)) = \tilde{R}^2(\theta) - R_0^2$; $\varepsilon^{(i)}(R_0,\theta) = Sp\varepsilon^{(i)}(R_0,\theta)$.

Спектр енергії квазічастинки в деформованій квантовій точці з незбуреною поверхнею $\mathrm{E}_{\mathrm{nl}}^{0}(\varepsilon^{(1)}(\mathrm{R}_0),\varepsilon^{(2)}(\mathrm{R}_0))$ знайдено з розв′язку рівняння Шредінгера спільно з рівнянням механічної рівноваги (2.23)

$$\hat{H}_{e,h}^{0}\psi_{\mathrm{nl}}^{0}(r,\theta,\varphi)=E_{nl}^{0}(\varepsilon^{(1)}(R_0,\theta),\varepsilon^{(2)}(R_0,\theta))\psi_{\mathrm{nl}}^{0}(r,\theta,\varphi) \tag{2.31}$$

з гамільтоніаном

$$\hat{H}_{e,h}^{0}=-\frac{\hbar^2}{2}\vec{\nabla}\frac{1}{m^{*(i)}}\vec{\nabla}+\hat{U}_{(e,h)}(r), \tag{2.32}$$

де $\hat{U}_{(e,h)}(r)$– потенціальна енергія квазічастинки в напруженій наногетеросистемі з InAs/GaAs з деформованими сферичними КТ InAs

$$\hat{U}_{(e,h)}(r)=\begin{cases}0, & 0\le r\le R_0,\\ \Delta E_{c,\upsilon}(0)-\left|a_{c,\upsilon}^{(1)}\varepsilon^{(1)}(r)\right|-\left|a_{c,\upsilon}^{(2)}\varepsilon^{(2)}(r)\right|, & R_0\le r\le R_1,\end{cases} \tag{2.33}$$

$m^{*(i)}$– ефективні маси електрона і дірки; $\Delta E_{c,\upsilon}(0)$ – глибина потенційної ями для електрона і дірки в ненапряженной квантовій точці; $a_c^{(i)}$, $a_\upsilon^{(i)}$– константи гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності і валентної зони i-того матеріалу, відповідно.

Зокрема, енергія основного E_{10}^{0} і збудженого станів E_{11}^{0} електрона і дірки в сферичній КТ є коренями наступних трансцендентних рівнянь:

$$\frac{m_{(e,h)}^{(2)}}{m_{(e,h)}^{(1)}}\left[1-k_{1(e,h)}R_0\cdot ctg\left(k_{1(e,h)}R_0\right)\right]=\frac{1+k_{2(e,h)}R_0+e^{2k_{2(e,h)}(R_0-R_1)}\cdot\left(k_{2(e,h)}R_0-1\right)}{1-e^{2k_{2(e,h)}(R_0-R_1)}},$$

$$\frac{\dfrac{tg\left(k_{1(e,h)}R_0\right)}{k_{1(e,h)}R_0}-1}{2+\left(k_{1(e,h)}R_0-\dfrac{2}{k_{1(e,h)}R_0}\right)tg\left(k_{1(e,h)}R_0\right)}=$$

$$=\frac{m^{(2)}_{(e,h)}}{m^{(1)}_{(e,h)}}\frac{1+k_{2(e,h)}R_0-\left(1-k_{2(e,h)}R_0\right)\dfrac{1+k_{2(e,h)}R_1}{1-k_{2(e,h)}R_1}\exp\left(2k_{2(e,h)}\left(R_0-R_1\right)\right)}{\left(1+\left(1-k_{2(e,h)}R_0\right)^2\right)\dfrac{1+k_{2(e,h)}R_1}{1-k_{2(e,h)}R_1}\exp\left(2k_{2(e,h)}\left(R_0-R_1\right)\right)-\left(1+\left(1+k_{2(e,h)}R_0\right)^2\right)}$$

де $k^2_{1(e,h)}=\dfrac{2m^{(1)}_{(e,h)}}{\hbar^2}E^0_{nl}(\varepsilon^{(1)}(R_0),\varepsilon^{(2)}(R_0))$,

$k^2_{2(e,h)}=\dfrac{2m^{(2)}_{(e,h)}}{\hbar^2}\left(\widehat{U}_{(e,h)}(r)-E^0_{nl}(\varepsilon^{(1)}(R_0),\varepsilon^{(2)}(R_0))\right)$,

$n=1,3,5...$

Коли системи координат, в яких описуються рух квазічастинки і форма поверхні квантової точки збігаються, то кут θ $(\theta\equiv\vec{r}\,\hat{}\,z)$ можна розглядати як кут між вектором моменту кількості руху квазічастинки і виділеним напрямком у просторі. Тоді кут θ у виразах для квантових величин квазічастинки повинен квантуватися $\cos^2\theta_{lm}=\dfrac{m^2}{l(l+1)}$, де $l,m-$ орбітальне і магнітне квантові числа квазічастинки, відповідно.

З урахуванням останнього виразу, формула (2.30) набуде вигляду

$$E_{nlm}=E^0_{nl}(\varepsilon^{(1)}(R_0),\varepsilon^{(2)}(R_0))\left\{1-p^2\left[4\left(\frac{m^2}{l(l+1)}\right)^{\frac{3}{2}}-3\left(\frac{m^2}{l(l+1)}\right)^{\frac{1}{2}}\right]^2\right\}. \qquad (2.34)$$

Як видно із співвідношення (2.34), знімається енергетичне виродження по квантовому числу m. Це пов'язано з пониженням симетрії форми квантової точки, тобто з переходом від сферичної симетрії до аксіальної.

Поправки першого порядку малості до хвильових функцій у квантовій точці і матриці запишуться у вигляді:

$$\Delta\psi^1_{nlm}(r,\theta,\varphi)+k_1^2\psi^1_{nlm}(r,\theta,\varphi)=-\frac{2m^{(1)}\Delta E^1_{nlm}}{\hbar^2}\psi^{0(1)}_{nl}(r,\theta,\varphi),\ 0\le r\le R(\theta),\ (2.35)$$

$$\Delta\psi^2_{nlm}(r,\theta,\varphi)+k_2^2\psi^2_{nlm}(r,\theta,\varphi)=-\frac{2m^{(2)}\Delta E^1_{nlm}}{\hbar^2}\psi^{0(2)}_{nl}(r,\theta,\varphi),\quad R(\theta)\le r\le R_1,$$

де $\psi^{0(i)}_{nl}(r,\theta,\varphi)=\begin{cases}R^{(1)}_{nl}(r)Y_{lm}, & 0\le r\le R_0\\ R^{(2)}_{nl}(r)Y_{lm}, & R_0\le r\le R_1\end{cases}$,

$\Delta E^1_{nlm}=E_{nlm}-E^0_{nl}(\varepsilon^{(1)}(R_0),\varepsilon^{(2)}(R_0))$ – поправка першого порядку малості для енергії.

Використовуючи метод функції Гріна знаходимо розв´язок задачі (2.35). Рівняння для функцій Гріна задачі (2.35) мають такий вигляд:

$$\begin{gathered}\Delta G_1(r,\rho)+k_1^2G_1(r,\rho)=-\delta(r-\rho),\\ \Delta G_2(r,\rho)+k_2^2G_2(r,\rho)=-\delta(r-\rho),\\ G_1(r,\rho)_{|\rho=R(\theta)}=G_2(r,\rho)_{|\rho=R(\theta)}.\end{gathered}\qquad(2.36)$$

Функція Гріна з початком в центрі КТ, для областей всередині і зовні нанооб'єкта представляється у вигляді:

$$G_1(r,\rho)=\frac{1}{4\pi}\left[\frac{\exp\{-ik_1|\vec r-\vec\rho|\}}{|\vec r-\vec\rho|}-\frac{\exp\left\{-ik_1\left|\vec r+\vec\rho-2R(\theta,\varphi)\frac{\vec\rho}{\rho}\right|\right\}}{\left|\vec r+\vec\rho-2R(\theta,\varphi)\frac{\vec\rho}{\rho}\right|}\right],0\le r\le R(\theta),(2.37)$$

$$G_2(r,\rho)=\frac{1}{4\pi}\left[\frac{\exp\{-ik_2|\vec r-\vec\rho|\}}{|\vec r-\vec\rho|}-\frac{\exp\left\{-ik_2\left|\vec r+\vec\rho-2R(\theta,\varphi)\frac{\vec\rho}{\rho}\right|\right\}}{\left|\vec r+\vec\rho-2R(\theta,\varphi)\frac{\vec\rho}{\rho}\right|}\right],\quad R(\theta)\le r\le R_1.$$

Використаємо наступний розклад [132] :

$$\frac{\exp\{-ik|\vec{r}-\vec{\rho}|\}}{|\vec{r}-\vec{\rho}|}=-k\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\begin{cases} j_l(-k\cdot r)h_l(-k\cdot\rho)P_l(\cos\gamma), r<\rho \\ j_l(-k\cdot\rho)h_l(-k\cdot r)P_l(\cos\gamma), r>\rho \end{cases}, \quad (2.38)$$

$$P_l(\cos\gamma)=\frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l}Y_{lm}(\theta,\varphi)Y_{lm}^{*}(\theta_1,\varphi_1),\ \ \gamma=\vec{r}\ \hat{}\ \vec{\rho}\ .$$

З врахуванням виразу (2.38) функція Гріна в сферичних координатах запишеться:

$$G_i(r,\rho,\theta,\varphi,\theta_1,\varphi_1)=\frac{1}{4\pi}\left[-k_i\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}4\pi\begin{cases} j_l(-k_i\cdot r)h_l(-k_i\cdot\rho)Y_{lm}(\theta,\varphi)Y_{lm}^{*}(\theta_1,\varphi_1), r<\rho \\ j_l(-k_i\cdot\rho)h_l(-k_i\cdot r)Y_{lm}(\theta,\varphi)Y_{lm}^{*}(\theta_1,\varphi_1), r>\rho \end{cases}\right] \quad (2.39)$$

Тоді, хвильова функція квазічастинки у неоднорідно-деформованому сферичному нанооб'єкті, що знаходиться в матриці матиме вигляд:

$$\psi_{nlm}^{1}(r,\theta,\varphi)=\chi_1\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\left\{\int_0^{r}G_1(r,\rho,\theta,\varphi,\theta_1,\varphi_1)+\int_r^{R(\theta)}G_1(r,\rho,\theta,\varphi,\theta_1,\varphi_1)\right\}\psi_{nl}^{0(1)}(\rho,\theta_1,\varphi_1)\times$$

$$\times\rho^2\sin\theta_1 d\rho d\theta_1 d\varphi_1+\chi_2\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\left\{\int_{R(\theta)}^{r}G_2(r,\rho,\theta,\varphi,\theta_1,\varphi_1)+\int_r^{R_1}G_2(r,\rho,\theta,\varphi,\theta_1,\varphi_1)\right\}\times$$

$$\times\psi_{nl}^{0(2)}(\rho,\theta_1,\varphi_1)\rho^2\sin\theta_1 d\rho d\theta_1 d\varphi_1\ , \quad (2.40)$$

де $\chi_i=-\dfrac{2m^{*(i)}\Delta E_{nlm}^{1}}{\hbar^2}$.

Розрахунки проведено для напруженої наногетеросистеми InAs/GaAs з КТ InAs при наступних значеннях параметрів [129,49]: $R_0=100\text{Å}$, $R_1=500\text{Å}$, $a_c^{(1)}=-5.08eB$, $a_c^{(2)}=-7.17eB$, $a^{(1)}=6.08\text{Å}$, $a^{(2)}=5.65\text{Å}$, $m^{(1)}=0.057m_0$, $m^{(2)}=0.065m_0$, $\alpha=0.657H/м$, $\Delta E_c(0)=0.83eB$. Енергія відраховується від дна деформованої потенціальної ями.

На рис.2.8 приведені результати числових розрахунків залежностей енергії електрона в основному і в першому збудженому станах від розміру КТ InAs :

в деформованій потенціальній ямі

- із збуренням сферичної форми КТ (рис.2, крива $1 - n = 1; l = 0; m = 0$; крива $1^{'} - n = 1; l = 1; m = \pm 1$);
- без збурення сферичної форми КТ (рис.2, крива $1^{' '} - n = 1; l = 1; m = 0$);

в недеформованій потенціальній ямі

- із збуренням сферичної форми КТ (рис.2, крива $2 - n = 1; l = 0; m = 0$; кривая $2^{'} - n = 1; l = 1; m = \pm 1$);
- без збурення сферичної форми КТ (рис.2, крива $3 - n = 1; l = 0; m = 0$; крива $2^{' '} - n = 1; l = 1; m = 0$) .

Як видно (рис.2.8) енергія електрона монотонно спадає із збільшенням розміру R_0 КТ, тобто енергетичні рівні зсуваються в довгохвильову область спектра, а енергетична відстань між ними зменшується. Величина енергії зростає із збільшенням квантових чисел l і m відносно основного стану. Слід відмітити, що збурення сферичної форми КТ, 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 при $R_0 = 30\text{Å}$, а при $R_0 = 100\text{Å}$ – 10меВ. Це пов'язано з тим, що деформаційний потенціал зменшує глибину потенційної ями в КТ. Зокрема, енергія першого збудженого стану електрона в деформованій потенціальній ямі в КТ (крива - $1^{'}$) з аксіально-симетричним збуренням її форми є меншою відносно енергії збудженого стану електрона $E_{111}^{'}$ у недеформованій скінченній потенціальній ямі (крива - $2^{'}$) на 385 меВ при $R_0 = 30\text{Å}$, а при

$R_0 = 100\text{Å}$ - 15 меВ . У випадку відсутності аксіально-симетричного збурення форми КТ характер функціональної залежності енергетичних рівнів першого збудженого стану від R_0 як з деформацією матеріалу КТ, так і без деформації зберігається такий же як і з аксіально-симетричним збуренням форми.

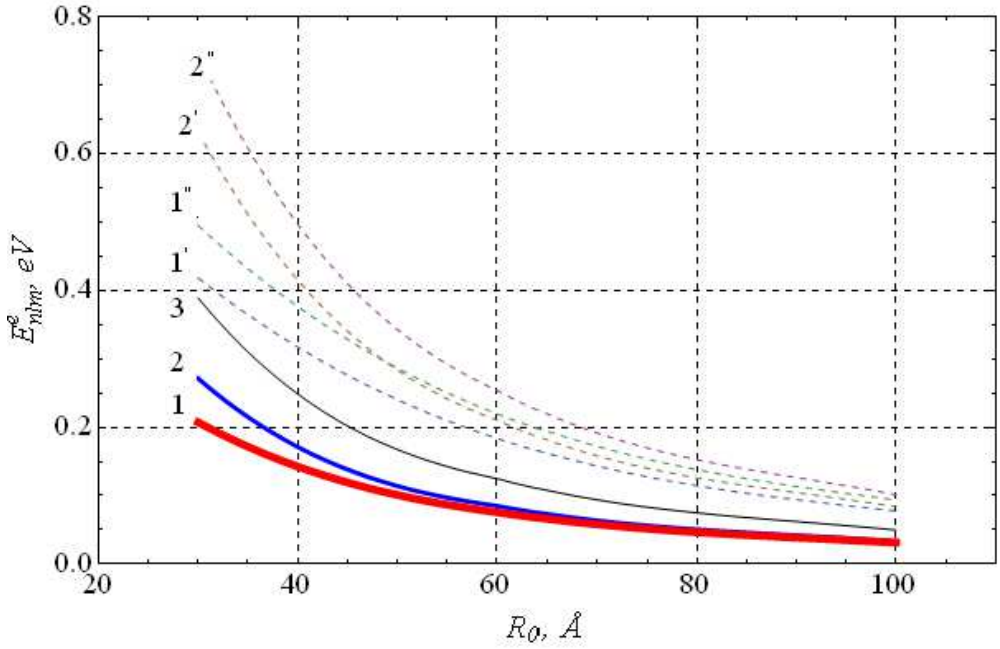

Рис.2.8. Спектр енергії електрона в квантовій точці:

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

Збурення сферичної форми КТ понижує енергію збудженого стану E_{110} електрона в деформованій потенціальній ямі до енергії збудженого стану E_{111} електрона в сферичній КТ (криві - $1^{'},1^{''}$). Крім цього, рівень енергії електрона E_{110} в деформованій потенціальній ямі з незбуреною сферичною формою КТ при $R_0 = 50\text{Å}$ перемішується з енергетичним рівнем електрона $E_{111}^{'}$ у недеформованій потенціальній ямі із збуреною сферичною формою КТ (криві - $1^{''}$ і $2^{'}$) .

На рис.2.9 представлені нормовані на максимальне значення квадрата модулів хвильових функцій електрона $\psi_{n,l,m}^{0}$ в основному $(n=1, l=m=0)$ і в першому збудженому $(n=1, l=1, m=0)$ станах в сферичній деформованій КТ без збурення її форми (3a, 3b-відповідно), а також поправки першого порядку до цих хвильових функцій електрона $\psi_{n,l,m}^{1}$ (3c, 3d) в деформованій КТ із збуреною формою .

Відхилення форми від сферичної приводить до перерозподілу густини ймовірності локалізації електрона всередині КТ, а взаємодія КТ з матрицею до зменшення ймовірності локалізації електрона в КТ.

Хвильова функція квазічастинки у неоднорідно-деформованому сферичному наноб'єкті, що знаходиться в матриці, чутлива як до збурення форми поверхні нанооб'єкта, так і до деформації його матеріалу. Зміна густини ймовірності локалізації квазічастинки буде проявлятися на оптичних, фотолюмінісцентних, контактних і поверхневих властивостях наногетероструктур.

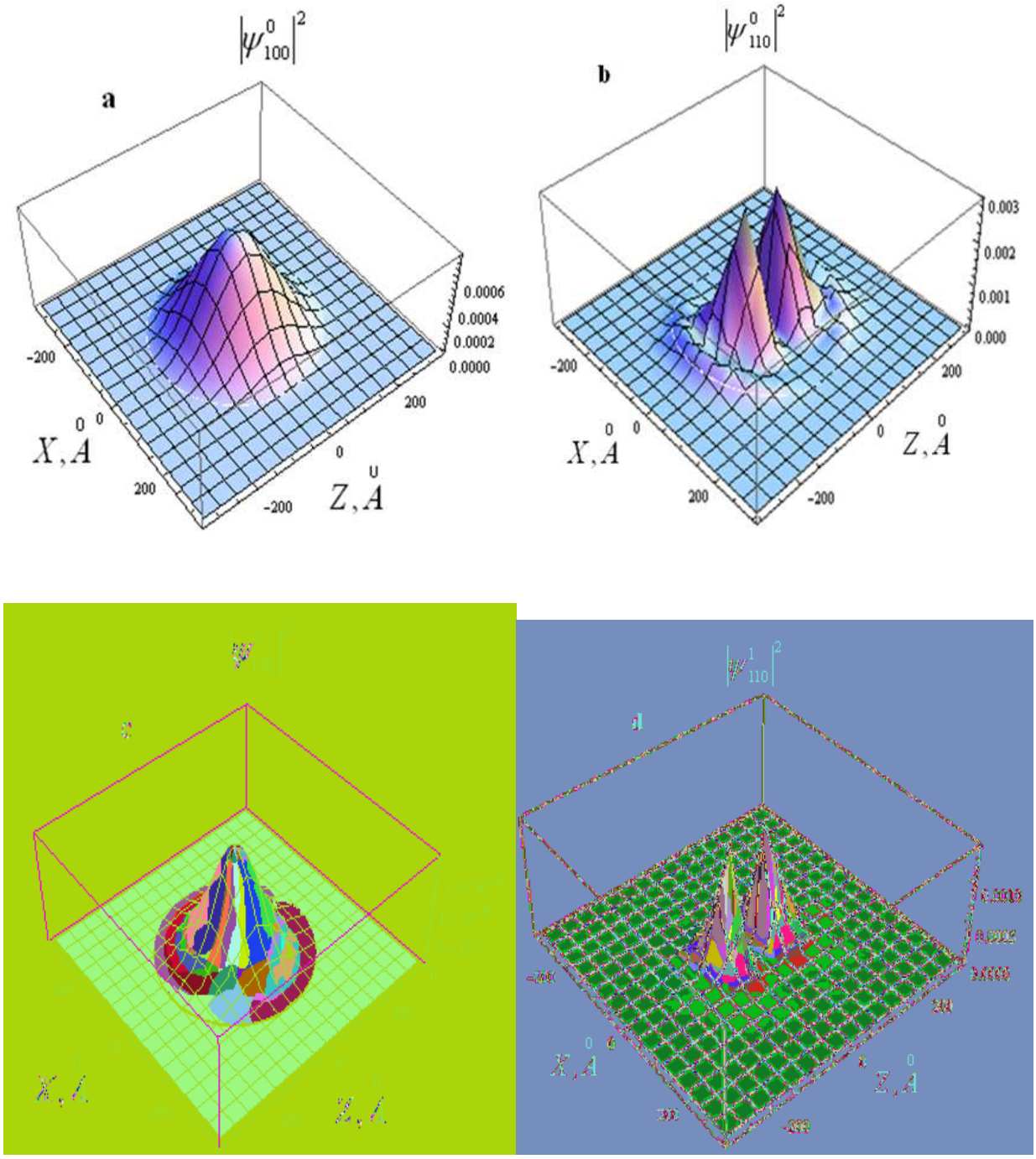

Рис.2.9. Нормовані на максимальне значення квадрати модулів хвильових функцій квантово-розмірних станів електрона в КТ: без збурення сферичної форми КТ в основному ψ^0_{100} (a) і в першому збудженому ψ^0_{110} станах (b), а також поправки першого порядку ψ^1_{100}, ψ^1_{110} до цих хвильових функцій – 3c , 3d, відповідно.

Висновки до розділу

1. У межах самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку побудовано модель впливу механічної складової електрон-деформаційної потенціалу, енергії електростатичної взаємодії зарядів на межі КТ– матриця на характер квантуючого потенціалу в напруженій наногетеросистемі InAs/GaAs з квантовими точками InAs .
2. Показано, що врахування електронної складової електрон-деформаційного потенціалу та енергії електростатичної взаємодії зарядів приводять до утворення в квантуючому потенціалі додаткових квазітрикутних бар'єрів та квазітрикутних потенціальних ям, енергетична висота яких залежить як від концентрації електронів провідності n_0 в матриці напруженої наногетеросистеми, так і поверхневої густини N_{QD} КТ. Такі напружені наногетеросистеми з КТ з таким модифікованим квантуючим потенціалом можуть використовуватись як елементи для створення резонансно-тунельних діодів, транспортними властивостями яких можна керувати як ступенем легування n_0 матриці, так і поверхневою густиною квантових точок N_{QD}.
3. Показано, що електронна складова електрон-деформаційного потенціалу та складова електростатичної енергії, зумовленої деформацією матеріалів КТ і матриці приводять до пониження енергії основного та збудженого станів електрона в КТ розміром $R_0 = 100\text{Å}$ на 16 меВ, 21 меВ відповідно.
4. Показано, що енергія електрона в основному і в першому збудженому станах у неоднорідно-деформованій скінченній потенціальній ямі КТ з аксіально-симетричним спотворенням її форми є меншою ніж енергія електрона у недеформованій скінченній потенціальні ямі з таким же спотворенням її форми.

5. Встановлено, що енергія електрона в основному і в першому збудженому станах в деформованій скінченній потенціальній ямі КТ з аксіально-симетричним спотворенням її форми є меншою ніж енергія електрона в сферичній КТ.
6. Показано, що перший збуджений рівень енергії електрона E_{110} у деформованій потенціальній ямі з незбуреною сферичною формою КТ при $R_0 = 50\text{Å}$ перемішується з першим збудженим енергетичним рівнем E'_{111} електрона в недеформованій потенціальній ямі з незбуреною сферичною формою КТ.
7. Встановлено, що аксіально-симетричне збурення сферичної форми квантової точки InAs і деформація її матерілу приводять до перерозподілу густини ймовірності локалізації електрона в КТ, а електрон-деформаційна взаємодія КТ з матрицею InAs/GaAs приводить до суттєвого зменшення густини ймовірності локалізації електрона в КТ.

РОЗДІЛ 3
ПРОСТОРОВО-ЧАСОВИЙ ПЕРЕРОЗПОДІЛ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ У ТРИШАРОВИХ НАПРУЖЕНИХ НАНОГЕТЕРОСИСТЕМАХ У МЕЖАХ САМОУЗГОДЖЕНОЇ ДЕФОРМАЦІЙНО-ДИФУЗІЙНОЇ МОДЕЛІ

3.1 Вступ

Останнім часом широке використання у мікроелектронних приладах знайшли гетероструктури з напруженими границями. Відомо, що оптичні та електричні властивості напівпровідникових приладів на основі квантових ям значною мірою залежать як від деформації ґратки, так і від просторового розподілу точкових дефектів. Такі дефекти можуть проникати ззовні або виникати в процесі росту.

Також у технології виготовлення оптоелектронних приладів відіграють важливу роль дифузійні процеси, які пов’язані із введенням домішок у напівпровідникову структуру. Зокрема, відомо, що арсенід галію, вирощений методом молекулярно-пучкової епітаксії при низькій температурі, містить надлишок миш’яку [63,64]. Впровадження надлишкового миш’яку спричиняє тетрагональне спотворення ґратки матеріалу GaAs і генерацію в ньому точкових дефектів: міжвузлових атомів (As), вакансій (Ga) та антиструктурних дефектів (As_{Ga}), що, в свою чергу, призводить до їх просторового перерозподілу.Деформація ґратки і концентрація генерованих точкових дефектів, які визначають фізичні властивості матеріалу, залежать від невідповідності параметрів ґраток контактуючих шарів гетероструктури, температури росту, молекулярних потоків Ga і As, концентрації і хімічної природи легуючих домішок.

Напруження, зумовлені неузгодженням ґраток епітаксійного шару і підкладки, можуть бути пружними у випадку, коли товщина шару не

перевищує певного критичного значення [70]. В шарах $In_xGa_{1-x}As$ з неузгодженням меншим за критичне при певних умовах спостерігається значний спад рухливості та інтенсивності фотолюмінісценції [70], що пов'язано із збільшенням числа точкових дефектів та відповідним збільшенням дифузійного бар'єру для атомів третьої групи.

Стаціонарний просторовий розподіл дефектів у межах самоузгодженої дифузійно-деформаційної моделі проведено в роботі [2].

Тому для створення приладів з наперед заданими фізичними властивостями виникає необхідність побудови теоретичної моделі, яка б описувала самоузгоджені дифузійно-деформаційні явища в гетероструктурах з власними точковими дефектами та домішками.

У цьому розділі побудовано самоузгоджену дифузійно-деформаційну модель нестаціонарного розподілу точкових дефектів (міжвузлових атомів та вакансій) у тришарових напружених наногетеросистемах $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs$ ($ZnTe/Zn_{1-x}Cd_xTe/ZnTe$). В межах цієї моделі:

- розвинуто теорію просторово-часового розподілу точкових дефектів у тришарових наногетеросистемах $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs$ з напруженими гетерограницями;
- розраховано просторово-часовий профіль розподілу точкових дефектів (міжвузлових атомів та вакансій) у тришаровій напруженій наногетеросистемі $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs$.

Результати цих досліджень представлено в роботах [133–135].

3.2 Модель просторово-часового перерозподілу точкових дефектів у тришаровій напруженій наногетеросистемі з врахуванням самоузгодженої деформаційно-дифузійної взаємодії

Розглянемо напружені наногетеросистеми GaAs/$In_xGa_{1-x}As$/GaAs (ZnTe/$Zn_{1-x}Cd_xTe$/ZnTe) з внутрішніми шарами $In_xGa_{1-x}As$, $Zn_{1-x}Cd_xTe$ товщиною 2*a*, що складається з трьох шарів (рис. 3.1), в яких вихідна середня концентрація дефектів становить $N_{d0}^{(1)}, N_{d0}^{(2)}, N_{d0}^{(3)}$ відповідно, а коефіцієнти дифузії D^1, D^2, D^3. Вважаємо, що зовнішні шари GaAs (ZnTe) мають товщини, які значно перевищують ширину внутрішнього шару гетероструктури ($\frac{2a}{L} << 1$), тому деформацією цих шарів можна знехтувати ($\varepsilon^{(i)}(z) = 0,\ i = 1,3$).

Механічна деформація, яка виникає за рахунок неузгодження параметрів ґраток контактуючих матеріалів гетеросистеми, моделюється функцією [2]:

$$\varepsilon^{(i)}(z) = \begin{cases} \varepsilon_0 \dfrac{z^2}{a^2}, & i = 2; \\ 0, & i = 1,\ 3; \end{cases} \tag{3.1}$$

$\varepsilon_0 = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} < 0$ – відносна зміна об’єму елементарної комірки нарощеного шару на гетеромежах $z = |a|$; $\varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \dfrac{a^{(i+1)} - a^{(i)}}{a^{(i)}}$,

$\varepsilon_{xx} = -\dfrac{2C_{12}^{(2)}}{C_{11}^{(2)}} \varepsilon_{yy},$ де i=1,3 відповідає зовнішнім шарам GaAs (ZnTe), i=2 – внутрішнім шарам $In_xGa_{1-x}As$ ($Zn_{1-x}Cd_xTe$), $a^{(i)}$– параметри кристалічних ґраток матеріалів GaAs (ZnTe) та $In_xGa_{1-x}As$ ($Zn_{1-x}Cd_xTe$) гетероструктури; $C_{11}^{(2)}$ та $C_{12}^{(2)}$ – пружні константи матеріалу $In_xGa_{1-x}As$ ($Zn_{1-x}Cd_xTe$).

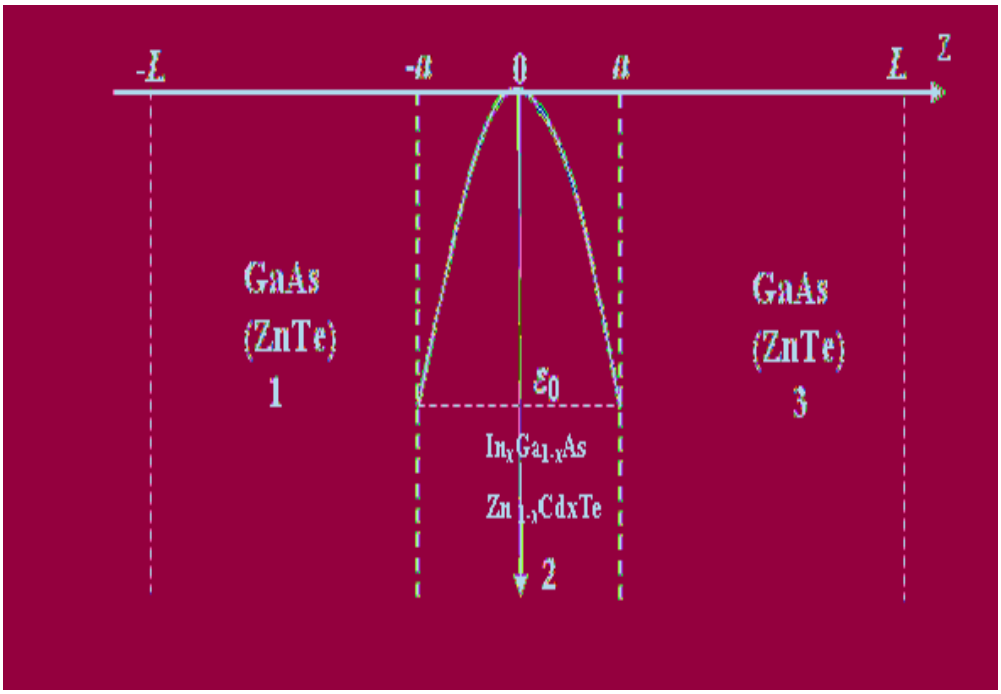

Рис. 3.1. Модель напружених наногетероструктур $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs$ ($ZnTe/Zn_{1-x}Cd_xTe/ZnTe$).

Епітаксійний ріст на підкладці з неузгодженими параметрами граток відбувається одночасно з дифузійним процесом, який зумовлений як градієнтом концентрації точкових дефектів $grad\vec{N}_{dl}^{(i)}(z,t)$, так і градієнтом параметра деформації $grad\vec{U}^{(i)}(z,t)$. Останній індукує додатковий дифузійний потік дефектів, який є протилежним до звичайного градієнтного концентраційного потоку дефектів. Тому основу цієї моделі складає самоузгоджена система нестаціонарних рівнянь для параметра деформації $U^{(i)}(z,t)$ та концентрації домішок $N_d^{(i)}(z,t)$ у напруженій гетеросистемі, перерозподіл яких, здійснюється як звичайним дифузійним потоком

$$J_{dyf.}^{(i)}(z,t)=-D_i\frac{\partial N_d^{(i)}(z,t)}{\partial z},$$

так і деформаційною складовою потоку

$$J_{def.}^{(i)}(z,t)=-D^{(i)}\frac{\theta_d^{(i)}}{k_BT}N_d^{(i)}(z,t)\frac{\partial U^{(i)}(z,t)}{\partial z},$$

де $\theta_d^{(i)} = K^{(i)}\Delta\Omega^{(i)}$ −механічний деформаційний потенціал, $D^{(i)}$ – коефіцієнт дифузії точкових дефектів в i-тому шарі, $K^{(i)} = \frac{C_{11}^{(i)} + 2C_{12}^{(i)}}{3}$ – модуль всестороннього стиску i-того матеріалу, $\Delta\Omega^{(i)}$–зміна об'єму елементарної комірки за наявності дефекта в i-тому шарі.

Нехай в даній гетеросистемі розподілені точкові дефекти з вихідною середньою концентрацією i-тому шарі $N_{d0}^{(i)}$. В результаті їх самоузгодженої взаємодії через поле деформації, створеної як невідповідністю параметрів ґраток контактуючих матеріалів гетеросистеми, так і наявністю дефектів відбувається зміна концентраційного профілю точкових дефектів та характеру деформації.

Механічна напруга в епітаксійних шарах, створена як точковими дефектами, так і неузгодженням параметрів ґраток контактуючих матеріалів, описується виразом:

$$\sigma^{(i)}(z,t) = \rho^{(i)}(c^{(i)})^2 U^{(i)}(z,t) - \theta_d^{(i)} N_d^{(i)}(z,t) - \rho^{(i)}(c^{(i)})\varepsilon^{(i)}(z), \quad (3.2)$$

де $\rho^{(i)}, c^{(i)}$ − густина *i*-того середовища та повздовжня швидкість звуку.

Хвильове рівняння для параметра деформації $U^{(i)}(z,t)$ запишеться:

$$\rho^{(i)} \frac{\partial^2 U^{(i)}}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \sigma^{(i)}}{\partial z^2}. \quad (3.3)$$

Враховуючи (3.2) рівняння (3.3) для перенормованої деформації $U^{(i)}(z,t)$ набуде вигляду:

$$\frac{1}{(c^{(i)})^2}\frac{\partial^2 U^{(i)}(z,t)}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 U^{(i)}(z,t)}{\partial z^2} - \frac{\theta_d^{(i)}}{\rho^{(i)}(c^{(i)})^2}\frac{\partial^2 N_d^{(i)}(z,t)}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 \varepsilon^{(i)}(z)}{\partial z^2}. \quad (3.4)$$

Рівняння для концентрації дефектів (міжвузлових атомів або вакансій) запишеться у вигляді [2]:

$$\frac{\partial N_d^{(i)}(z,t)}{\partial t} = D^{(i)}\frac{\partial^2 N_d^{(i)}(z,t)}{\partial z^2} - D^{(i)}\frac{\theta_d^{(i)}}{k_B T}\left[N_d^{(i)}(z,t)\frac{\partial U^{(i)}(z,t)}{\partial z^2}\right] + G_d^{(i)} - \frac{N_d^{(i)}(z,t)}{\tau_d^{(i)}} \quad (3.5)$$

$G_d^{(i)}$ – швидкість генерації дефектів; $\tau_d^{(i)}$- час життя дефекта в i-тому шарі, який визначається частотою та амплітудою механічних коливань у мегагерцовому діапазоні ($\omega \geq 10^6\, Гц, \tau_d^{(i)} \approx 1 мкс$), що виникають в процесі формування гетерограниць в напружених наногетероструктурах і виникнення дефектів (акустична емісія) [136].

В результаті отримали самоузгоджену систему рівнянь (3.4),(3.5) для визначення просторово-часового розподілу концентрації дефектів $N_d^{(i)}(z,t)$ та параметра деформації $U^{(i)}(z,t)$ в різних областях тришарової наногетероструктури.

3.3 Розв'язок самоузгодженої системи рівнянь для просторово-часового розподілу концентрації дефектів дефектів та деформації кристалічної гратки гетероструктури

Представимо концентрацію дефектів у вигляді:

$$N_d^{(i)}(z,t) = N_{d0}^{(i)} + N_d^{(i)}(z,t), \qquad (3.6)$$

де $N_{dl}^{(i)}$ – просторово-неоднорідна складова концентрації дефектів.

Враховуючи вираз (3.6) в наближенні $N_{dl}^{(i)} << N_{d0}^{(i)}$, рівняння дифузії запишемо у вигляді:

$$\frac{\partial N_{dl}^{(i)}(z,t)}{\partial t} = D^{(i)} \frac{\partial^2 N_{dl}^{(i)}(z,t)}{\partial z^2} - D^{(i)} N_{d0}^{(i)} \frac{\theta_d^{(i)}}{k_B T} \frac{\partial^2 U^{(i)}(z,t)}{\partial z^2} + G'^{(i)}_d - \frac{N_{dl}^{(i)}(z,t)}{\tau_d^{(i)}}, \qquad (3.7)$$

де $G'^{(i)}_d = G_d^{(i)} - \frac{N_{d0}^{(i)}(z,t)}{\tau_d^{(i)}}$ — швидкість генерації точкових дефектів під впливом механічних коливань у мегагерцовому діапазоні ($\omega \approx 10^6\, Гц$), що

виникають в процесі формування гетерограниць в напружених наногетероструктурах.

В подальшому розв'язок самоузгодженої системи рівнянь (3.4),(3.5) будемо шукати в наближенні

$$\left(\frac{(L_d^{(i)})^2}{2D^{(i)}}\right)^2 \frac{\partial^2 U^{(i)}(z,t)}{\partial t^2} << \varepsilon_0, \text{ тобто } \frac{\partial^2 U^{(i)}(z,t)}{\partial t^2} \approx 0 \ . \qquad (3.8)$$

У наближенні (3.8) з рівняння (3.4) знайдемо $\frac{\partial^2 U^{(i)}(z,t)}{\partial z^2}$ і підставимо в рівняння (3.7). В результаті отримуємо диференційне рівняння для визначення просторово-часового розподілу дефектів у напруженій гетеросистемі

$$\frac{\partial N_{dl}^{(i)}(z,t)}{\partial t} = \left[D^{(i)} - \left(\frac{N_{d0}^{(i)}}{N_{dc}^{(i)}}\right)\right]\frac{\partial^2 N_{dl}^{(i)}(z,t)}{\partial z^2} -$$

$$- D^{(i)} \frac{N_{d0}^{(i)}}{N_{dc}^{(i)}\Delta\Omega} \frac{\theta_d^{(i)}}{k_B T} \frac{\partial^2 \varepsilon^{(i)}(z,t)}{\partial z^2} + G'^{(i)}_d - \frac{N_{dl}^{(i)}(z,t)}{\tau_d^{(i)}}, \qquad (3.9)$$

де $N_{dc}^{(i)} = \frac{k_b T \rho^{(i)} (c^{(i)})^2}{\theta_d^{(i)}}$ – критична концентрація дефектів після перевищення якої відбувається самоорганізація дефектів [92].

Крім того, на межах шарів гетероструктури, зображеної на рис. 3.1, повинні виконуватись умови рівності концентрацій домішок, а також їх потоків:

$$\frac{\partial N_{dl}^{(1)}(z,t)}{\partial z}\Big|_{z\to-\infty} = 0, \qquad \frac{\partial N_{dl}^{(3)}(z,t)}{\partial z}\Big|_{z\to\infty} = 0,$$

$$N_{dl}^{(1)}(-a,t) = N_{dl}^{(2)}(-a,t), \quad N_{dl}^{(2)}(a,t) = N_{dl}^{(3)}(a,t), \qquad (3.10)$$

$$J_1(-a,t) = J_2(-a,t), \qquad J_2(a,t) = J_3(a,t),$$

де $J_i(z,t) = -\frac{\partial}{\partial z}\left[D^{(i)} N_{dl}^{(i)}(z,t)(1-\varepsilon^{(i)}(z))\right].$

В початковий момент часу

$$N_{dl}^{(i)}(z,0)=0 \tag{3.11}$$

Ввівши безрозмірні змінні:

$$\theta=\frac{t}{\tau_d^{(2)}},\ L_d^{(i)}=\sqrt{D^{(i)}\tau_d^{(i)}},$$

$$N_{dl}^{(i)}(z,t)=Y_i(x,t)G'^{(i)}_d\tau_d^{(i)}, \tag{3.12}$$

$$\hat{z}=\frac{\hat{z}}{L},\ \hat{L}=\frac{L}{a},\ N_{d0}^{(i)}=G'^{(i)}_d\tau_d^{(i)},$$

$$\beta=D^2\frac{N_{d0}^{(2)}}{N_{dc}^{(2)}}\frac{2\varepsilon_0}{\Delta\Omega^{(2)}a^2G_d^{(2)}},$$

рівняння (3.9) та крайові умови (3.10) набудуть вигляду:

$$\frac{\partial Y_1(\hat{z},\theta)}{\partial\theta}=\frac{D^{(1)}}{D^{(2)}}\left(\frac{L_d^{(2)}}{L}\right)^2\left(1-\frac{N_{d0}^{(1)}}{N_{dc}^{(1)}}\right)\frac{\partial^2Y_2(\hat{z},\theta)}{\partial\hat{z}^2}-\lambda_1(Y_1(\hat{z},\theta)-1)$$

$$\frac{\partial Y_2(\hat{z},\theta)}{\partial\theta}=\left(\frac{L_d^{(2)}}{L}\right)^2\left(1-\frac{N_{d0}^{(2)}}{N_{dc}^{(2)}}\right)\frac{\partial^2Y_2(\hat{z},\theta)}{\partial\hat{z}^2}+\beta-\lambda_2(Y_2(\hat{z},\theta)-1) \tag{3.13}$$

$$\frac{\partial Y_3(\hat{z},\theta)}{\partial\theta}=\frac{D^{(3)}}{D^{(2)}}\left(\frac{L_d^{(2)}}{L}\right)^2\left(1-\frac{N_{d0}^{(3)}}{N_{dc}^{(3)}}\right)\frac{\partial^2Y_3(\hat{z},\theta)}{\partial\hat{z}^2}-\lambda_3(Y_3(\hat{z},\theta)-1)$$

де $\lambda_1=\frac{D^{(1)}}{D^{(2)}}\left(\frac{L_d^{(2)}}{L_d^{(1)}}\right)^2,\quad \lambda_2=1,\quad \lambda_3=\frac{D^{(3)}}{D^{(2)}}\left(\frac{L_d^{(2)}}{L_d^{(3)}}\right)^2$.

$$\frac{\partial Y_1(\hat{z},\theta)}{\partial\hat{z}}\Big|_{z\to-L}=0,\qquad \frac{\partial Y_3(\hat{z},\theta)}{\partial\hat{z}}\Big|_{z\to L}=0,$$

$$Y_1(-\hat{a},t)=\frac{G_d^{(2)}\tau_d^{(2)}}{G_d^{(1)}\tau_d^{(1)}}Y_2(-\hat{a},t),\quad Y_2(-\hat{a},t)=\frac{G_d^{(3)}\tau_d^{(3)}}{G_d^{(2)}\tau_d^{(2)}}Y_3(-\hat{a},t), \tag{3.14}$$

$$\frac{D^{(1)}}{D^{(2)}}\left(\frac{L_d^{(2)}}{L}\right)^2\left(-1+\frac{N_{d0}^{(1)}}{N_{dc}^{(1)}}\right)\frac{\partial Y_1(-\hat{a},\theta)}{\partial\hat{z}}=\left(\frac{L_d^{(2)}}{L}\right)^2\left(-1+\frac{N_{d0}^{(2)}}{N_{dc}^{(2)}}\right)\frac{\partial Y_2(-\hat{a},\theta)}{\partial\hat{z}}+\beta\hat{a}$$

$$\left(\frac{L_d^{(2)}}{L}\right)^2\left(-1+\frac{N_{d0}^{(2)}}{N_{dc}^{(2)}}\right)\frac{\partial Y_2(-\hat{a},\theta)}{\partial\hat{z}}+\beta\hat{a}=\frac{D^{(3)}}{D^{(2)}}\left(\frac{L_d^{(2)}}{L}\right)^2\left(-1+\frac{N_{d0}^{(3)}}{N_{dc}^{(3)}}\right)\frac{\partial Y_3(-\hat{a},\theta)}{\partial\hat{z}}$$

Параметр β (ф-ла 3.12) описує характер деформаційного впливу, зумовленого як дією напруженої гетеромежі, так і дією точкових дефектів виду центрів стиску або розтягу. Цей параметр може приймати як додатні $\beta>0$ $(\varepsilon_0>0, \Delta\Omega^{(2)}>0; \varepsilon_0<0, \Delta\Omega^{(2)}<0)$, так і від'ємні $\beta<0$ значення $(\varepsilon_0>0, \Delta\Omega^{(2)}<0; \varepsilon_0<0, \Delta\Omega^{(2)}>0)$.

Розв'язок рівнянь (3.13) з крайовими умовами (3.14) шукаємо у вигляді:

$$Y_i(\hat{z},\theta)=e^{-\theta}\,Z_i(\hat{z},\theta), \tag{3.15}$$

де $Z_i(\hat{z},\theta)$ задовольняє наступним рівнянням:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial Z_1(\hat{z},\theta)}{\partial\theta} &= \frac{D_1}{D_2}\left(\frac{L_d^{(2)}}{L}\right)^2\left(1-\frac{N_{d0}{}^{(1)}}{N_{dc}{}^{(1)}}\right)\frac{\partial^2 Z_2(\hat{z},\theta)}{\partial\hat{z}^2}+\lambda_1 e^{\lambda_1\theta}\\
\frac{\partial Z_2(\hat{z},\theta)}{\partial\theta} &= \left(\frac{L_d^{(2)}}{L}\right)^2\left(1-\frac{N_{d0}{}^{(2)}}{N_{dc}{}^{(2)}}\right)\frac{\partial^2 Z_2(\hat{z},\theta)}{\partial\hat{z}^2}+e^{\theta}(\beta+1)\\
\frac{\partial Z_3(\hat{z},\theta)}{\partial\theta} &= \frac{D_3}{D_2}\left(\frac{L_d^{(2)}}{L}\right)^2\left(1-\frac{N_{d0}{}^{(3)}}{N_{dc}{}^{(3)}}\right)\frac{\partial^2 Z_3(\hat{z},\theta)}{\partial\hat{z}^2}+\lambda_3 e^{\lambda_3\theta}
\end{aligned} \tag{3.16}$$

з такими крайовими умовами:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial Z_1(\hat{z},\theta)}{\partial\hat{z}}\Big|_{z\to -L}=0,\\
&e^{-\lambda_1\theta}Z_1(-\hat{a},\theta)=\frac{G_d^{(2)}\tau_d^{(2)}}{G_d^{(1)}\tau_d^{(1)}}e^{-\theta}Z_2(-\hat{a},\theta),\\
&e^{-\theta}Z_2(-\hat{a},\theta)=\frac{G_d^{(3)}\tau_d^{(3)}}{G_d^{(2)}\tau_d^{(2)}}e^{-\lambda_3\theta}Z_3(-\hat{a},\theta),
\end{aligned} \tag{3.17}$$

$$\frac{D^{(1)}}{D^{(2)}}\left(\frac{L_d^{(2)}}{L}\right)^2 e^{-\lambda_1\theta}\left(-1+\frac{N_{d0}^{(1)}}{N_{dc}^{(1)}}\right)\frac{\partial Z_1(-\hat{a},\theta)}{\partial\hat{z}}=\left(\frac{L_d^{(2)}}{L}\right)^2 e^{-\theta}\left(-1+\frac{N_{d0}^{(2)}}{N_{dc}^{(2)}}\right)\frac{\partial Z_2(-\hat{a},\theta)}{\partial\hat{z}}-\beta\hat{a}$$

$$\left(\frac{L_d^{(2)}}{L}\right)^2 e^{-\theta}\left(-1+\frac{N_{d0}^{(2)}}{N_{dc}^{(2)}}\right)\frac{\partial Z_2(-\hat{a},\theta)}{\partial\hat{z}}+\beta\hat{a}=\frac{D^{(3)}}{D^{(2)}}\left(\frac{L_d^{(2)}}{L}\right)^2 e^{-\lambda_3\theta}\left(-1+\frac{N_{d0}{}^{(3)}}{N_{dc}{}^{(3)}}\right)\frac{\partial Z_3(-\hat{a},\theta)}{\partial\hat{z}}$$

$$\frac{\partial Z_3(\hat{z},\theta)}{\partial\hat{z}}\Big|_{z\to L}=0.$$

Для знаходження розв'язку диференційних рівнянь (3.16) з крайовими умовами (3.17) скористаємось інтегральними перетвореннями Лапласа:

$$X_i(\hat{z},p)=\int_0^\infty Z_i(\hat{z},\theta)e^{-p\theta}d\theta \tag{3.18}$$

Тоді диференційні рівняння (3.16) та крайові умови (3.17) приймуть вигляд:

$$\begin{aligned}
&H_1 X_1''(\hat{x},p)-p\,X_1(\hat{x},p)+\tfrac{1}{p-1}=0\\
&H_2 X_2''(\hat{x},p)-p\,X_2(\hat{x},p)+\tfrac{\beta+1}{p-1}=0\\
&H_3 X_3''(\hat{x},p)-p\,X_3(\hat{x},p)+\tfrac{1}{p-1}=0,
\end{aligned} \tag{3.19}$$

$$\begin{aligned}
&X_1(-\hat{a},p)=X_2(-\hat{a},p)\\
&-H_1X_1'(-\hat{a},p)=-H_2X_2'(-\hat{a},p)-\tfrac{\beta\hat{a}}{p-1}\\
&X_2(\hat{a},p)=X_3(\hat{a},p)\\
&-H_2X_2'(\hat{a},p)+\tfrac{\beta\hat{a}}{p-1}=-H_3X_3'(\hat{a},p)
\end{aligned} \tag{3.20}$$

де $H_i=\left(1-\frac{N_{d0}^{(i)}}{N_{dc}^{(i)}}\right)$.

Аналітичні розв'язки диференційних рівнянь (3.19) в кожному із шарів мають наступний вигляд:

$$X_1(\hat{z},p)=C_1e^{\sqrt{\frac{p}{H_1}}\hat{z}}+\frac{1}{p(p-1)},\qquad \text{де } -\hat{a}\le\hat{z}\le-\hat{\mathrm{L}},$$

$$X_2(\hat{z},p)=C_2e^{\sqrt{\frac{p}{H_2}}\hat{z}}+C_3e^{-\sqrt{\frac{p}{H_2}}\hat{z}}+\frac{\beta+1}{p(p-1)},\ \text{де } -\hat{a}\le\hat{z}\le\hat{a}, \qquad (3.21)$$

$$X_3(\hat{z},p)=C_4e^{-\sqrt{\frac{p}{H3}}\hat{z}}+\frac{1}{p(p-1)},\qquad \text{де } \hat{a}\le\hat{z}\le\hat{L}.$$

Константи інтегрування C_1,C_2,C_3,C_4 визначаємо із наступної системи алгебраїчних рівнянь:

$$C_1e^{-\sqrt{\frac{p}{H_1}}\hat{a}}-C_2e^{-\sqrt{\frac{p}{H_2}}\hat{a}}-C_3e^{\sqrt{\frac{p}{H2}}\hat{a}}=\frac{\beta}{p(p-1)}, \qquad (3.22)$$

$$-C_1\sqrt{H_1}e^{-\sqrt{\frac{p}{H_1}}\hat{a}}+C_2\sqrt{H_2}e^{-\sqrt{\frac{p}{H_2}}\hat{a}}-C_3\sqrt{H_2}e^{\sqrt{\frac{p}{H2}}\hat{a}}=\frac{\beta\hat{a}}{\sqrt{p}(p-1)},$$

$$C_2e^{\sqrt{\frac{p}{H_2}}\hat{a}}+C_3e^{-\sqrt{\frac{p}{H_2}}\hat{a}}-C_4e^{-\sqrt{\frac{p}{H_3}}\hat{a}}=-\frac{\beta}{p(p-1)},$$

$$-C_2\sqrt{H_2}e^{\sqrt{\frac{p}{H2}}\hat{a}}+C_3\sqrt{H_2}e^{-\sqrt{\frac{p}{H_2}}\hat{a}}+C_4\sqrt{H_3}e^{-\sqrt{\frac{p}{H3}}\hat{a}}=\frac{\beta\hat{a}}{\sqrt{p}(p-1)}.$$

Здійснивши обернене перетворення Лапласа, отримано просторово-часовий перерозподіл точкових дефектів в першому, другому та третьому напружених шарах відповідно:

$$Y_1(\hat{z},\theta)=e^{-\theta}Z_1(\hat{z},\theta)-e^{-\theta}+1,$$

$$Y_2(\hat{z},\theta)=Z_2(\hat{z},\theta)\left(1-e^{-\theta}\right)(1+\beta), \qquad (3.23)$$

$$Y_3(\hat{z},\theta)=e^{-\theta}Z_3(\hat{z},\theta)-e^{-\theta}+1,$$

де функції $Z_1(\hat{z},\theta)$, $Z_2(\hat{z},\theta)$ та $Z_3(\hat{z},\theta)$ є розв'язками диференційних рівнянь (3.16) з крайовими умовами (3.17) відповідно:

$$Z_1(\hat{z},\theta)=\frac{1}{b}\left(e^{\theta}-1+e^{\theta}\frac{\hat{a}}{\sqrt{H_2}}Erf\left(\sqrt{\theta}\right)\right)l_3+\sum_{i=1}^{2}\sum_{m=0}^{\infty}(-1)^m\frac{a^m}{b^{m+1}}\times$$

$$\times\sum_{k=1}^{\infty}l_{2i-1}r_{2i-1}\theta^k\Phi_1(\hat{z},\theta,k)\sum_{m=0}^{\infty}(-1)^m\frac{a^m}{b^{m+1}}\sum_{k=1}^{\infty}l_2r_2\theta^k\Phi_2(\hat{z},\theta,k), \qquad (3.24)$$

де

$$\Phi_1(\hat{z},\theta,k)=-\frac{{}_1F_1\left(\frac{1}{2}-k,\frac{3}{2},-\frac{r_{2i-1}^2}{4\theta}\right)}{\sqrt{\theta}\,\Gamma\left(k+\frac{1}{2}\right)}+\frac{{}_1F_1\left(-k,\frac{1}{2},-\frac{r_{2i-1}^2}{4\theta}\right)}{r_{2i-1}\Gamma(k+1)}-(-1)^i\frac{{}_1F_1\left(\frac{1}{2}-k,\frac{1}{2},-\frac{r_{2i-1}^2}{4\theta}\right)}{\sqrt{\theta}\,r_{2i-1}\Gamma\left(k+\frac{1}{2}\right)}+\frac{{}_1F_1\left(1-k,\frac{3}{2},-\frac{r_{2i-1}^2}{4\theta}\right)}{\theta\Gamma\left(k+\frac{1}{2}\right)},$$

$$\Phi_2(\hat{z},\theta,k)=-\frac{{}_1F_1\left(\frac{1}{2}-k,\frac{3}{2},-\frac{r_2^2}{4\theta}\right)}{\sqrt{\theta}\,\Gamma\left(k+\frac{1}{2}\right)}+\frac{{}_1F_1\left(-k,\frac{1}{2},-\frac{r_2^2}{4\theta}\right)}{r_2\,\Gamma(k+1)},$$

$$a=\left(\sqrt{H_1}-\sqrt{H_2}\right)\left(\sqrt{H_2}-\sqrt{H_3}\right), \qquad b=\left(\sqrt{H_1}+\sqrt{H_2}\right)\left(\sqrt{H_2}+\sqrt{H_3}\right),$$

$$l_1=\beta\sqrt{H_2}\left(\sqrt{H_3}-\sqrt{H_2}\right),\ \ l_2=-\frac{l_1\hat{a}}{\sqrt{H_2}},\ \ l_3=\beta\sqrt{H_2}\left(\sqrt{H_3}+\sqrt{H_2}\right),\ \ l_4=\frac{l_3\hat{a}}{\sqrt{H_2}},$$

$$r_1=-\frac{\hat{z}+\hat{a}}{\sqrt{H_1}}+\frac{4\hat{a}(m+1)}{\sqrt{H_2}}; \qquad r_2=-\frac{\hat{z}+\hat{a}}{\sqrt{H_1}}+\frac{2\hat{a}(2m+1)}{\sqrt{H_2}}; \qquad r_3=-\frac{\hat{z}+\hat{a}}{\sqrt{H_1}}+\frac{4\hat{a}m}{\sqrt{H_2}}.$$

$$Z_2(\hat{z},\theta)=\frac{1}{b}\left((e^{\theta}-1)(p_3+p_4)+(p_5+p_6)e^{\theta}Erf\left(\sqrt{\theta}\right)\right)+$$

$$\sum_{i=1}^{4}\sum_{m=0}^{\infty}(-1)^m\frac{a^m}{b^{m+1}}\sum_{k=1}^{\infty}p_ie_i\theta^k\Phi_3(\hat{x},\theta,k), \qquad (3.25)$$

де

$$\Phi_3(\hat{z},\theta,k)=-\frac{{}_1F_1\left(\frac{1}{2}-k,\frac{3}{2},-\frac{e_i^2}{4\theta}\right)}{\sqrt{\theta}\,\Gamma\left(k+\frac{1}{2}\right)}+\frac{{}_1F_1\left(-k,\frac{1}{2},-\frac{e_i^2}{4\theta}\right)}{e_i\,\Gamma(k+1)}+\frac{\hat{a}}{\sqrt{H_2}}\frac{{}_1F_1\left(\frac{1}{2}-k,\frac{1}{2},-\frac{e_i^2}{4\theta}\right)}{\sqrt{\theta}\,r_{2i-1}\Gamma\left(k+\frac{1}{2}\right)}+\frac{{}_1F_1\left(1-k,\frac{3}{2},-\frac{e_i^2}{4\theta}\right)}{\theta\Gamma\left(k+\frac{1}{2}\right)},$$

$$p_1=\beta\sqrt{H_2}\left(\sqrt{H_3}-\sqrt{H_2}\right), \qquad p_1=\beta\hat{a}\left(\sqrt{H_2}-\sqrt{H_3}\right), \qquad p_3=-\frac{p_2\hat{a}}{\sqrt{H_2}},$$

$$p_4=-\beta\sqrt{H_3}\left(\sqrt{H_1}+\sqrt{H_2}\right),\ \ p_5=-\frac{p_4\hat{a}}{\sqrt{H_3}},\ \ p_6=\beta\sqrt{H_1}\left(\sqrt{H_2}-\sqrt{H_3}\right),$$

$$p_7=-\beta\sqrt{H_1}\left(\sqrt{H_2}+\sqrt{H_3}\right), \qquad p_8=\beta\hat{a}\left(\sqrt{H_2}+\sqrt{H_3}\right),$$

$$e_1=-\frac{\hat{z}+\hat{a}}{\sqrt{H_2}}+\frac{4\hat{a}(m+1)}{\sqrt{H_2}},\qquad e_2=-\frac{\hat{z}+\hat{a}}{\sqrt{H_2}}+\frac{2\hat{a}(2m+1)}{\sqrt{H_2}},\qquad e_3=-\frac{\hat{z}+\hat{a}}{\sqrt{H_2}}+\frac{4\hat{a}m}{\sqrt{H_2}},$$

$$e_4=\frac{\hat{z}-\hat{a}}{\sqrt{H_2}}+\frac{4\hat{a}(m+1)}{\sqrt{H_2}},\qquad e_5=\frac{\hat{z}-\hat{a}}{\sqrt{H_2}}+\frac{2\hat{a}(2m+1)}{\sqrt{H_2}}.$$

$$Z_3(\hat{z},\theta)=\frac{1}{b}\left(e^{\theta}-1+e^{\theta}\frac{\hat{a}}{\sqrt{H_2}}Erf\left(\sqrt{\theta}\right)\right)l_3+\sum_{i=1}^{2}\sum_{m=0}^{\infty}(-1)^m\frac{a^m}{b^{m+1}}\times$$

$$\times\sum_{k=1}^{\infty}l_{2i-1}r_{2i-1}\theta^k\Phi_4(\hat{z},\theta,k)+\sum_{m=0}^{\infty}(-1)^m\frac{a^m}{b^{m+1}}\sum_{k=1}^{\infty}l_2r_2\theta^k\Phi_5(\hat{z},\theta,k),\qquad(3.26)$$

де

$$\Phi_4(\hat{z},\theta,k)=-\frac{{}_1F_1\left(\frac{1}{2}-k,\frac{3}{2},-\frac{r_{2i-1}^2}{4\theta}\right)}{\sqrt{\theta}\,\Gamma\left(k+\frac{1}{2}\right)}+\frac{{}_1F_1\left(-k,\frac{1}{2},-\frac{r_{2i-1}^2}{4\theta}\right)}{r_{2i-1}\Gamma(k+1)}+\frac{\hat{a}}{\sqrt{H_2}}\frac{{}_1F_1\left(\frac{1}{2}-k,\frac{1}{2},-\frac{r_{2i-1}^2}{4\theta}\right)}{\sqrt{\theta}\,r_{2i-1}\Gamma\left(k+\frac{1}{2}\right)}+\frac{{}_1F_1\left(1-k,\frac{3}{2},-\frac{r_{2i-1}^2}{4\theta}\right)}{\theta\Gamma\left(k+\frac{1}{2}\right)},$$

$$\Phi_5(\hat{z},\theta,k)=-\frac{{}_1F_1\left(\frac{1}{2}-k,\frac{3}{2},-\frac{r_2^2}{4\theta}\right)}{\sqrt{\theta}\,\Gamma\left(k+\frac{1}{2}\right)}+\frac{{}_1F_1\left(-k,\frac{1}{2},-\frac{r_2^2}{4\theta}\right)}{r_2\Gamma(k+1)},$$

$$l_1=\beta\sqrt{H_2}\left(\sqrt{H_1}-\sqrt{H_2}\right),\quad l_2=-\frac{l_1\hat{a}}{\sqrt{H_2}},\ l_3=\beta\sqrt{H_2}\left(\sqrt{H_2}+\sqrt{H_1}\right),\ l_4=\frac{l_3\hat{a}}{\sqrt{H_2}},$$

$$r_1=\frac{\hat{z}-\hat{a}}{\sqrt{H_1}}+\frac{4\hat{a}(m+1)}{\sqrt{H_2}},\ r_2=\frac{\hat{z}-\hat{a}}{\sqrt{H_1}}+\frac{2\hat{a}(2m+1)}{\sqrt{H_2}},\ r_3=\frac{\hat{z}-\hat{a}}{\sqrt{H_1}}+\frac{4\hat{a}m}{\sqrt{H_2}}.$$

3.4 Просторово-часовий профіль розподілу концентрації дефектів у тришаровій напруженій наногетеросистемі

Числові розрахунки проводили для таких значень параметрів: $\varepsilon_0 = 0.07$; $a = 0.05L; 0.1L$ (L-товщина наногетероструктури); $\frac{N_{do}^{(1)}}{N_{dc}^{(1)}} = 0.5$; $\frac{N_{do}^{(2)}}{N_{dc}^{(2)}} = 0.8$; $\frac{N_{do}^{(3)}}{N_{dc}^{(3)}} = 0.6$; $C_{11}^{(2)} = 0.833 Mbar$; $C_{12}^{(2)} = 0.453 Mbar$; $C_{11}^{(1)} = 1.223 Mbar$; $C_{12}^{(1)} = 0.571 Mbar$; T=300K; $\theta_d^{(i)} = 5eV$; $D^{(i)} = 10^{-5} \frac{см^2}{c}$; $\tau_d^{(2)} = 1 мкс$ [92].

На рис.3.2 та 3.3 зображено просторово-часовий перерозподіл вакансій та міжвузлових атомів у тришаровій напруженій наногетеросистемі $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs$ під впливом деформації, зумовленої як неузгодженням параметрів контактуючих граток ($\varepsilon_0 = \frac{\Delta a}{a} = 7\%$), так і дією точкових дефектів.

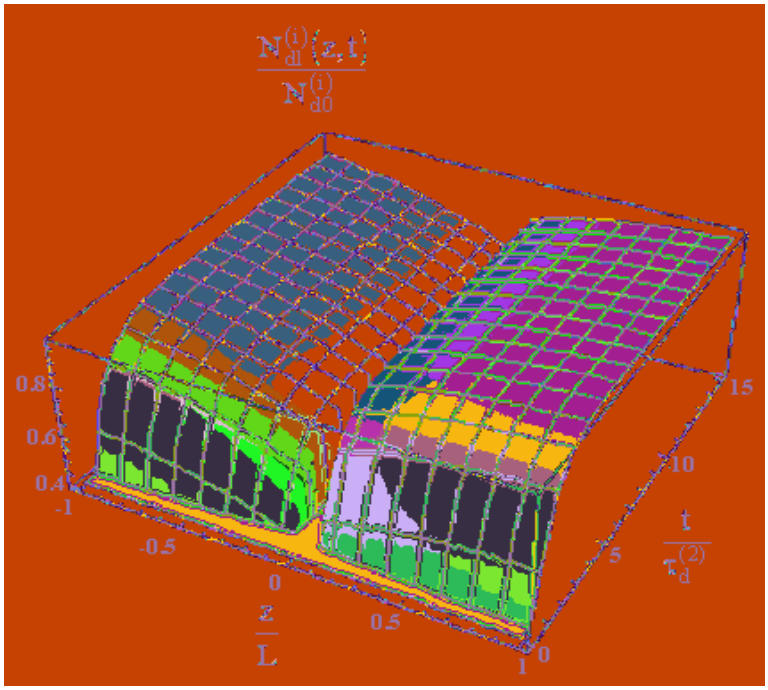

Рис.3.2. Профіль нестаціонарного розподілу концентрації вакансій тришаровій напруженій наногетеросистемі з неоднорідно - стиснутим внутрішнім шаром ($\frac{N_{do}^{(1)}}{N_{dc}^{(1)}} = 0.5$; $\frac{N_{do}^{(2)}}{N_{dc}^{(2)}} = 0.8$; $\frac{N_{do}^{(3)}}{N_{dc}^{(3)}} = 0.6$; $\beta = 10.2$).

Як показує профіль нестаціонарного розподілу концентрації дефектів виду центрів стиску (вакансії, рис.3.2) або розтягу (міжвузлові атоми, рис.3.3), розрахований при різних середніх значеннях концентрації дефектів у шарах, у випадку, коли внутрішній епітаксійний шар зазнає неоднорідної деформації стиску ($\varepsilon_0 < 0$) за рахунок неузгодження параметрів граток контактуючих епітаксійних шарів, спостерігається збільшення (зменшення) концентрації міжвузлових атомів (вакансій) у цьому шарі, тоді як у випадку розтягу ($\varepsilon_0 > 0$) внутрішнього епітаксійного шару буде спостерігатись зменшення (збільшення) концентрації міжвузлових атомів.

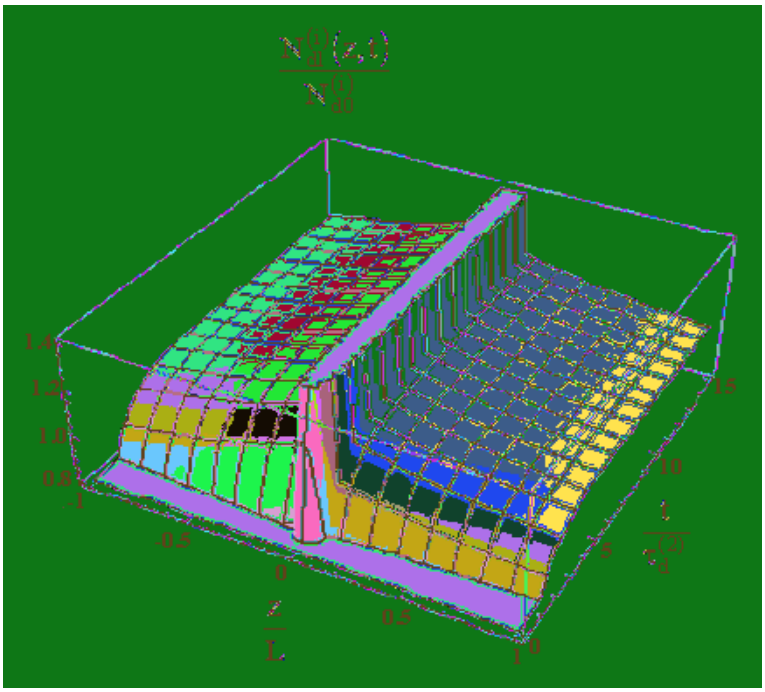

Рис.3.3. Профіль нестаціонарного розподілу концентрації міжвузлових атомів у тришаровій напруженій наногетеросистемі з неоднорідно-стиснутим внутрішнім шаром ($\frac{N_{do}^{(1)}}{N_{dc}^{(1)}}=0.5;\frac{N_{do}^{(2)}}{N_{dc}^{(2)}}=0.8;\frac{N_{do}^{(3)}}{N_{dc}^{(3)}}=0.6;\beta$=-10.2).

Такий ефект спостерігався в експериментальних роботах [73,74] по дослідженню спектрів фотолюмінісценції напружених гетероструктур, де було показано, що напружені гетерошари GaAs/$In_xGa_{1-x}As$/GaAs затримують дифузію водню та дефектів в об'єм кристалічної системи. А це в свою чергу

приводить до збільшення деформації розтягу (стиску) у середньому епітаксійному шарі тришарової наногетероструктури.

На рис.3.4 та 3.5 представлені числові розрахунки перерізу просторово-часового розподілу концентрації вакансій вздовж осі росту (OX) 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) для різних товщин внутрішнього шару наногетероструктури ($a = 0.05L$, рис.3.4 та $a = 0.1L$, рис.3.5).

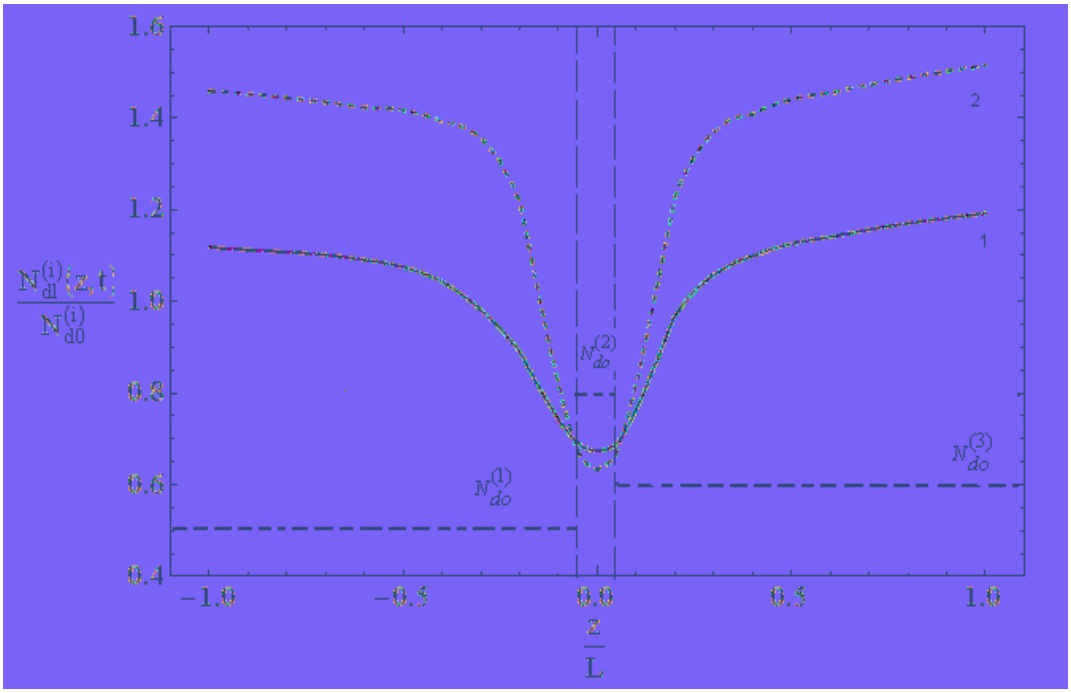

Рис. 3.4. Переріз просторово-часового розподілу вакансій вздовж осі росту в різні моменти часу: 1– в момент часу t=$\tau_d^{(2)}$; 2 – t=$5\tau_d^{(2)}$; $a = 0.05L$.

Як видно із рис.3.4 та 3.5, починаючи з моменту часу $t \geq 5\tau_d^{(2)}$ практично відбувається встановлення стаціонарного стану розподілу дефектів у тришаровій напруженій наногетеросистемі. На проміжку часу $0 \leq t \leq 5\tau_d^{(2)}$ відбувається просторово-часовий перерозподіл дефектів так, що в неоднорідно-стиснутому внутрішньому шарі (рис.3.1, область 2) їх стає

менше відносно вихідного середнього значення $N_{d0}^{(2)}$ на $\approx$13,7% ,16% в моменти часу $\tau_d^{(2)}$, $5\tau_d^{(2)}$ відповідно. Таким чином, деформаційне поле внутрішнього шару ($-a<z<a$) очищає робочу від дефектів, що в кінцевому робить матеріал робочої області з більшою інтенсивністю фотолюмінесценції [73]. У зовнішніх шарах (рис.3.1 області 1,3) гетеросистеми концентрація дефектів асиметрично монотонно зростає від межі поділу контактуючих матеріалів і стає більшою за їх середнє значення $N_{d0}^{(1)}$, $N_{d0}^{(3)}$.

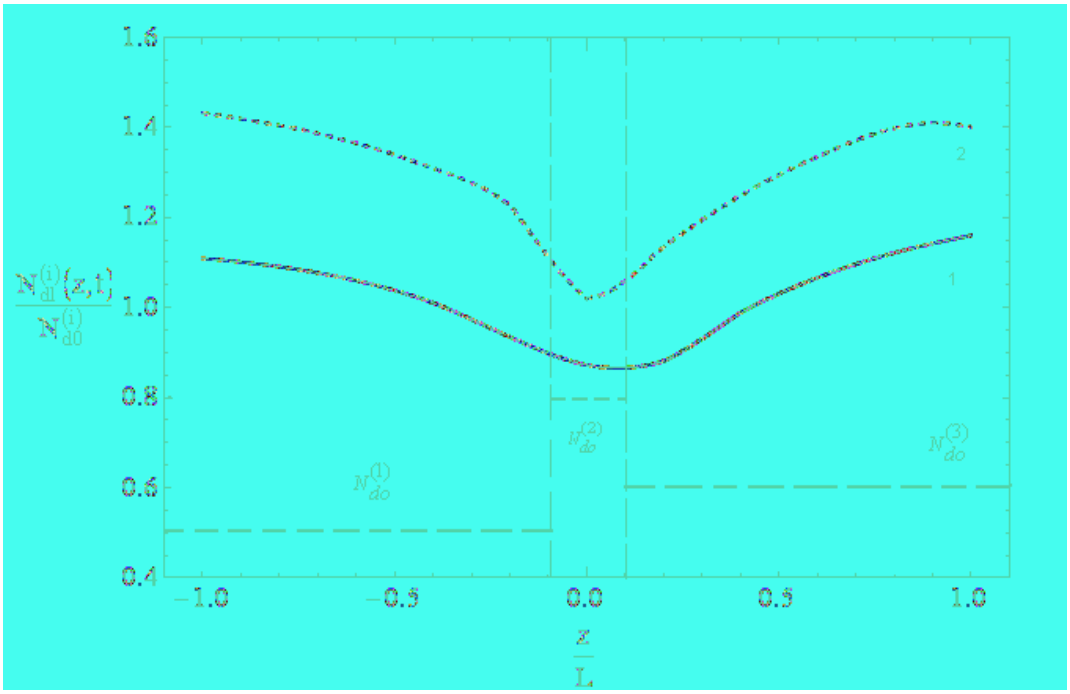

Рис.3.5.Переріз просторово-часового розподілу вакансій вздовж осі росту в різні моменти часу: 1– в момент часу $\tau_d^{(2)}$; 2 – $\tau_d^{(2)}$; $a=0.1L$.

У випадку відсутності дефектів ($N_{d0}^{(i)}=0$) у контактуючих матеріалах створюється неоднорідна деформація тільки за рахунок неузгодження параметрів граток контактуючих матеріалів ($\varepsilon^{(i)}(z)=\varepsilon_0\frac{z^2}{a^2}, i=2$), а при відсутності неузгодження параметрів граток ($\varepsilon_0=0$) деформація ($U^{(i)}=\frac{\theta_d^{(i)}}{K^{(i)}}N_d^{(i)}$) зумовлена тільки точковими дефектами.

Висновки до розділу

1. Встановлено, що концентраційний профіль точкових дефектів при $N_{d0}^{(i)} < N_{dc}^{(i)}$ має немонотонний характер з мінімумом всередині внутрішнього шару $In_xGa_{1-x}As$, який збіднюється точковими дефектами виду центрів стиску, коли внутрішній шар гетероструктури $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs$ зазнає неоднорідного стиску, а у випадку неоднорідного розтягу має місце обернений ефект.
2. За умов, коли відношення вихідних середніх концентрацій точкових дефектів виду центрів стиску $\frac{N_{d0}^{(i)}}{N_{dc}^{(i)}}(\mathrm{i}=1,2,3)$ і деформаційний параметр β становлять 0.5, 0.8, 0.6 та 10.2, відповідно, показано: якщо товщина середнього шару $In_xGa_{1-x}As$ наногетеросистеми $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs$ становить $a = 0.05L$, то встановлена концентрація вакансій $\frac{N_{d0}^{(2)}(\bar{z},5\tau^{(2)})}{N_{dc}^{(2)}}$ в цьому шарі є меншою за вихідну середню концентрацію $N_{d0}^{(2)}$ на 16%.
3. Встановлено, що зменшення концентрації точкових дефектів виду центрів стиску в середньому шарі $In_xGa_{1-x}As$ напруженої наногетеросистеми $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs$ 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.

РОЗДІЛ 4
ЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ПОВЕРХНЕВО-БАР′ЄРНИХ СТРУКТУР ВИДУ ШОТТКІ З ВБУДОВАНИМ ШАРОМ КВАНТОВИХ ТОЧОК

4.1 Вступ

Побудова наноелектронних приладів на основі масивів КТ (InAs/GaAs, CdTe/ZnTe(ZnNe)) дозволяє ефективно керувати їхніми електричними та оптичними характеристиками. Зокрема, за наявності вбудованих в область просторового заряду КТ бар'єрної структури виду Шотткі за певних технологічних параметрів можливе виникнення S- подібних вольт-амперних характеристик діодів Шотткі, які можуть бути використані у високочастотній електроніці. Тому, інтенсивний розвиток нанотехнологій в останні роки привів до необхідності побудови математичних моделей, які б описували фізико-механічні та електричні властивості нанооб’єктів (2D, 1D, 0D – наногетеросистем).

Відомо, що струмопереніс в основному визначається параметрами потенціального бар’єру Шотткі в напівпровіднику поблизу межі з металом, а змінювати висоту бар’єру та електричні характеристики діодів Шотткі, крім звичайним та δ-легуванням, можна введенням шару КТ у контактуючий з металом напівпровідник [3]. Теоретичні дослідження вольт-амперних характеристик у поверхнево-бар’єрних 2-D системах виду метал – i – n^+ (або p^+) – напівпровідник були проведені у рамках дрейфово-дифузійного наближення з врахуванням самоузгоджених граничних умов [106] без наявності шару квантових точок в області просторового заряду та без врахування деформаційних ефектів.

У цьому розділі в межах дрейфово-деформаційно-дифузійної моделі доліджено ВАХ поверхнево-бар’єрної структури метал – n-GaAs: InAs – n^+-GaAs з вбудованим шаром КТ в область просторового заряду напівпровідника з врахуванням самоузгоджених граничних умов та встановлено критерії на технологічні параметри (розмір квантової точки (КТ), поверхневу густину квантових точок, розміщення шару квантових точок відносно контакту метал – n- GaAs) поверхнево-бар’єрної структури виду Шотткі з вбудованим шаром КТ при яких вольт-амперна характеристика (ВАХ) має S-подібний характер.

На основі методу послідовних надрелаксацій [137] досліджено вплив квантових точок розміщених в області просторового заряду напівпровідника на топологію розподілу двовимірного електростатичного потенціалу $\varphi(x, y)$ з врахуванням деформаційних полів, що виникають на межі КТ – матриця (~7% – InAs/GaAs; ~4% CdTe/ZnTe). Для розв’язку такого виду задач широке застосування отримали скінченно-різницеві [130,137,138], варіаційні методи [139], метод інтегральних рівнянь [140] та функціонально-дискретні (FD) методи [141].

У цьому розділі приведено результати розв'язку наступних задач:

- досліджено топологію розподілу електростатичного потенціалу в бар’єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром квантових точок в область просторового заряду напівпровідника;
- розраховано 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.

Результати цих досліджень представлено в роботах [142–144].

4.2 Математична модель розподілу електростатичного потенціалу в поверхнево-бар'єрній структурі виду Шотткі з вбудованим шаром квантових точок

Геометрична модель структури метал – нелегований напівпровідник (i - шар, GaAs) з вбудованим шаром КТ (InAs), який розміщений на відстані $x = L_d$ від поверхні металу та сильно легований напівпровідник (n^+ - GaAs), представлена на рис. 4.1. У шарі (напрямок OY, рис. 4.1) квантові точки розміщені періодично на відстані h одна від одної. Початок координати x відраховується від межі контакту метал − напівпровідник у напрямку напівпровідника.

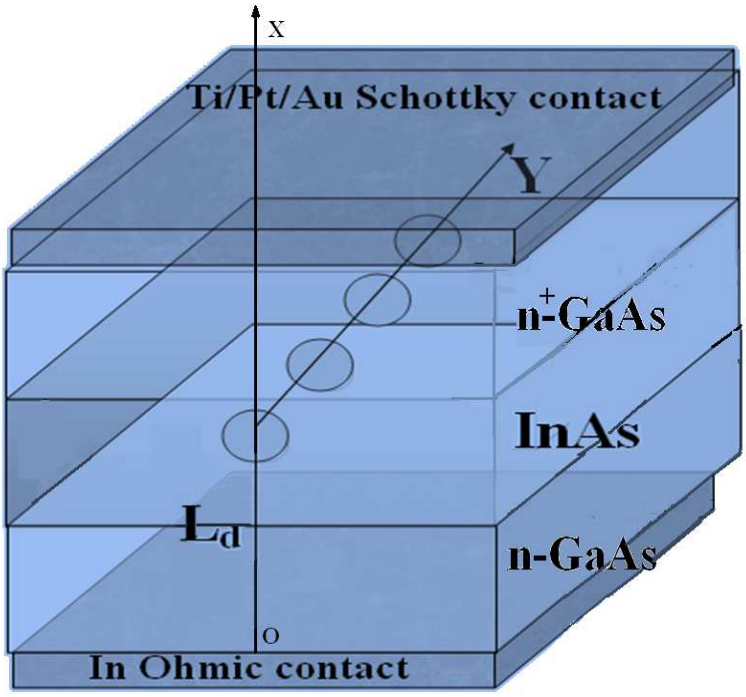

Рис.4.1. Геометричне представлення діода Шотткі структури метал – n-GaAs: InAs – n^+-GaAs

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

$$\frac{\partial^2\varphi_i}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\varphi_i}{\partial y^2}=-\frac{eN_d}{\varepsilon_d^{(i)}\varepsilon_0}+\frac{eN_{QD}}{\varepsilon_d^{(i)}\varepsilon_0 L_d}\delta\left(\frac{x}{L_d}-1\right)\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta\left(\frac{y}{h}-n\right),\ i=\begin{cases}1\equiv InAs,\\ 2\equiv GaAs,\end{cases} \quad (4.1)$$

з крайовими умовами:

$$\begin{aligned}&\varphi(0,x)=\varphi_{BS},\\ &\varphi(L_x,y)=0,\\ &\varphi(x,0)=\varphi_{BS}-\frac{1}{2}\frac{eN_d}{2\varepsilon\varepsilon_0}x^2,\\ &\varphi(x,L_y)=\varphi_{BS}-\frac{1}{2}\frac{eN_d}{2\varepsilon\varepsilon_0}x^2,\end{aligned} \quad (4.2)$$

де $\varepsilon_d^{(i)}$ – відносна діелектрична проникність i-того матеріалу наногетеросистеми; ε_0 – діелектрична стала; e – заряд електрона; N_{QD} – поверхнева густина квантових точок; N_d – концентрація донорів; L_d – відстань від металу до шару КТ; h – відстань між квантовими точками в напрямку OY; φ_{BS} – висота потенціального бар'єру на межі метал – напівпровідник.

У правій частині рівняння (4.1) перший доданок описує густину заряду іонізованої домішки, другий доданок – густину заряду, зумовлену захопленням електронів у стани квантових точок, які виникають за рахунок просторового квантування та виникненням дискретного спектру у квантовій точці. Ці стани локалізовані в просторі, тому густину заряду в квантових точках можна змоделювати за допомогою добутку узагальненої функції $\delta\left(\frac{x}{L_d}-1\right)$ на ряд із узагальнених функцій $\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta\left(\frac{y}{h}-n\right)$.

За правилом сумування за Пуассоном ряд з узагальнених функцій $\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta(y-nh)$ можна звести до вигляду:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta(y-nh)=\frac{1}{|h|}\sum_{k=-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\delta\left(\frac{y}{h}-z\right)e^{2\pi ikz}dz=\frac{1}{|h|}\left(1+2\sum_{k=1}^{\infty}\cos 2\pi k\frac{y}{h}\right). \quad (4.3)$$

Підставивши співвідношення (4.3) у рівняння (4.1) та здійснивши перехід до безрозмірних величин отримуємо двовимірне рівняння Пуассона:

$$\frac{\partial^2\tilde{\varphi}_i}{\partial\tilde{x}^2}+\frac{\partial^2\tilde{\varphi}_i}{\partial\tilde{y}^2}=-1+\frac{N_{QD}}{N_d L_d}\delta(\tilde{x}-1)\left(1+2\sum_{k=1}^{\infty}\cos 2\pi k\frac{\tilde{y}L_d}{h}\right), \qquad (4.4)$$

з крайовими умовами:

$$\begin{aligned}&\tilde{\varphi}(0,x)=\tilde{\varphi}_{BS},\\ &\tilde{\varphi}(\tilde{L}_x,y)=0,\\ &\tilde{\varphi}(x,0)=\tilde{\varphi}_{BS}-\frac{1}{2}\tilde{x}^2,\\ &\tilde{\varphi}(x,\tilde{L}_y)=\tilde{\varphi}_{BS}-\frac{1}{2}\tilde{x}^2,\end{aligned} \qquad (4.5)$$

де $\tilde{x}=\frac{x}{L_d},\tilde{y}=\frac{y}{L_d},\tilde{L}_x=\frac{L_x}{L_d},\tilde{L}_y=\frac{L_y}{L_d},\tilde{\varphi}=\frac{\varphi}{\varphi_0},\varphi_0=\frac{\varepsilon\varepsilon_0}{eN_d}\frac{\varepsilon\varepsilon_0}{eN_d}(L_d)^2.$

Розв’язування крайової задачі (4.4),(4.5) здійснюється на основі методу послідовних надрелаксацій [137]. Для апроксимації двовимірного рівняння Пуассона прямокутна область $(0\le\tilde{x}\le\tilde{L}_x,\ 0\le\tilde{y}\le\tilde{L}_y)$ розбивається рівномірною сіткою, на вузлах якої, використовується п'ятиточкова різницева схема .

Для знаходження розподілу потенціалу у внутрішніх вузлах сітки використовується наступна ітераційна різницева схема:

$$\varphi_{i,j}^{k+1}=\varphi_{i,j}^{k}+p\left(\frac{\varphi_{i+1,j}^{k}+\varphi_{i-1,j}^{k}+\varphi_{i,j+1}^{k}+\varphi_{i,j-1}^{k}-4\varphi_{i,j}^{k}-h^2 g_{i,j}}{4}\right)=\varphi_{i,j}^{k}+pr_{\mathrm{i,j}}^{k}, \qquad (4.6)$$

де $i=1,2,\ldots,n-1;\ \ j=1,2,\ldots,m-1,\ \ k=0,1,\ldots$; R_0 – радіус КТ;

$$g_{i.j}=-1+\frac{N_{QD}}{N_d}\frac{1}{\sqrt{\pi}R_0}e^{-(L_d/R_0)^2(\tilde{x}_i-1)^2}\left(1+2\sum_{k=1}^{\infty}\cos\left(2\pi k\frac{\tilde{y}_j L_d}{h}\right)\right).$$

Крайові умови представлялись наступним чином:

$$\varphi_{0,j} = \tilde{\varphi}_{\mathrm{BS}},$$
$$\varphi_{n,j} = 0, \qquad (4.7)$$
$$\varphi_{i,0} = \tilde{\varphi}_{BS} - \tfrac{1}{2}\tilde{x}_i^{\,2},$$
$$\varphi_{i,m} = \tilde{\varphi}_{BS} - \tfrac{1}{2}\tilde{x}_i^{\,2},$$

$i = 1,\ldots,n;\ j = 1,\ldots,m.$

У методі послідовних надрелаксацій коефіцієнт p може приймати значення $1 \le p < 2$. Оптимальне значення параметра p обчислюється за допомогою формули [137]:

$$p = \frac{4}{2 + \sqrt{4 - \left(\cos\left(\frac{\pi}{n-1}\right) + \cos\left(\frac{\pi}{m-1}\right)\right)^2}} \qquad (4.8)$$

Умовою зупинки ітераційної розрахункової схеми (4.6)−(4.7) є виконання такої нерівності:

$$\| r \| \le \varepsilon, \qquad (4.9)$$

де $\| r \| = \max_{i,j} \left| r_{i,j}^{(k)} \right|$, $\varepsilon > 0$.

У табл. 1 приведені чисельні дослідження швидкості збіжності ітераційної розрахункової схеми (4.6)−(4.9) при різних значеннях параметра p (кількість ітерацій при різних значення p, при якому точність чисельного розв'язку не перевищує 0.0001).

$p = 1$	$p = 1{,}5$	p – визначається за формулою (4.8)
1335	1158	1051

Таблиця 1. Кількість ітерацій при різних значення p.

4.3 Топологія розподілу двовимірного електростатичного потенціалу з врахуванням деформаційних полів на межі КТ– матриця

На рисунках 4.2a, 4.3a приведені чисельні розрахунки розподілу електростатичного потенціалу $\varphi(x, y)$ в площині XY шару квантових точок (InAs), вбудованих у область просторового заряду в напівпровіднику (GaAs) на відстанях $x = L_d$ від межі контакту метал − легований напівпровідник.

Квантові точки розміром R_0 технологічно вбудовані в шар напівпровідника на відстані $x = L_d$ від металу. Як видно (рис.4.2c), сімейство потенціалів $\varphi(y)$ при $x = 50Å,100Å,150Å,200Å,250Å$ вздовж напрямку розміщення КТ,тобто в напрямку OY має осциляційний характер з періодом h, причому, період осциляції визначається кроком розміщення КТ. У напрямку OX, перпендикулярному до межі контакту метал − легований напівпровідник, сімейство потенціалів $\varphi(x)$ (рис.4.2d) при $y = 50Å,100Å,150Å,200Å,250Å$ має немонотонний характер, функціональна залежність якого, при $\frac{x}{L_d} >> 1$ асимптотично описується експоненційним законом.

На рис. 4.2b, 4.3b приведені числові розрахунки еквіпотенціальних ліній в околі квантових точок при різних значеннях параметрів $\varphi_{BS}, L_d, h, R_0, N_d$, які використовувались у експерименті [111]. Аналіз розрахунків еквіпотенціальних ліній в бар'єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром КТ показує (рис. 4.2b, 4.3b), що крім електричного поля $\vec{E}_{BS}$, створеного на межі контакту метал − n- напівпровідник існує ще електричне поле $\vec{E}_{QD}$ утворене на межі розділу КТ − напівпровідникова матриця . Результуюче електричне поле в бар'єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром КТ визначається суперпозицією цих двох полів $\vec{E}_R = \vec{E}_{BS} + \vec{E}_{QD}$.

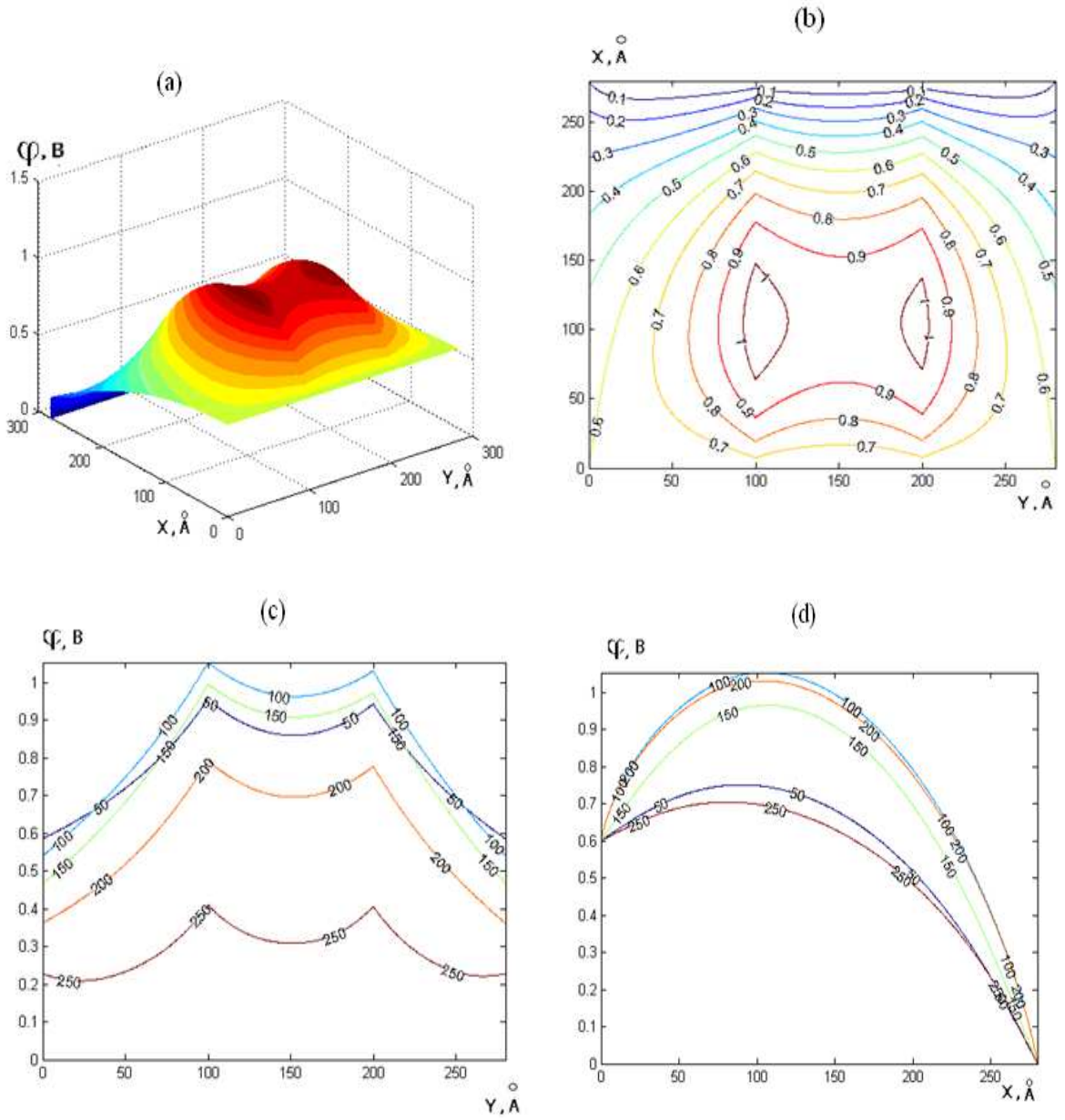

Рис.4.2. Топологія розподілу електростатичного потенціалу в бар'єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром КТ у область просторового заряду напівпровідника (a), еквіпотенціальних ліній в околі квантових точок (b), координатна залежність розподілу електростатичного потенціалу вздовж напрямку розміщення КТ в напрямку OY (c) та в напрямку, перпендикулярному до межі контакту метал-легований напівпровідник в напрямку осі OX (d): $\varphi_{BS} = 0.6B$, $L_d = 40\text{Å}$, $h = 100\text{Å}$, $R_0 = 30\text{Å}$, $N_d = 10^{18}\ см^{-3}$, $N_{QD} = 3 \cdot 10^{10}\ см^{-2}$.

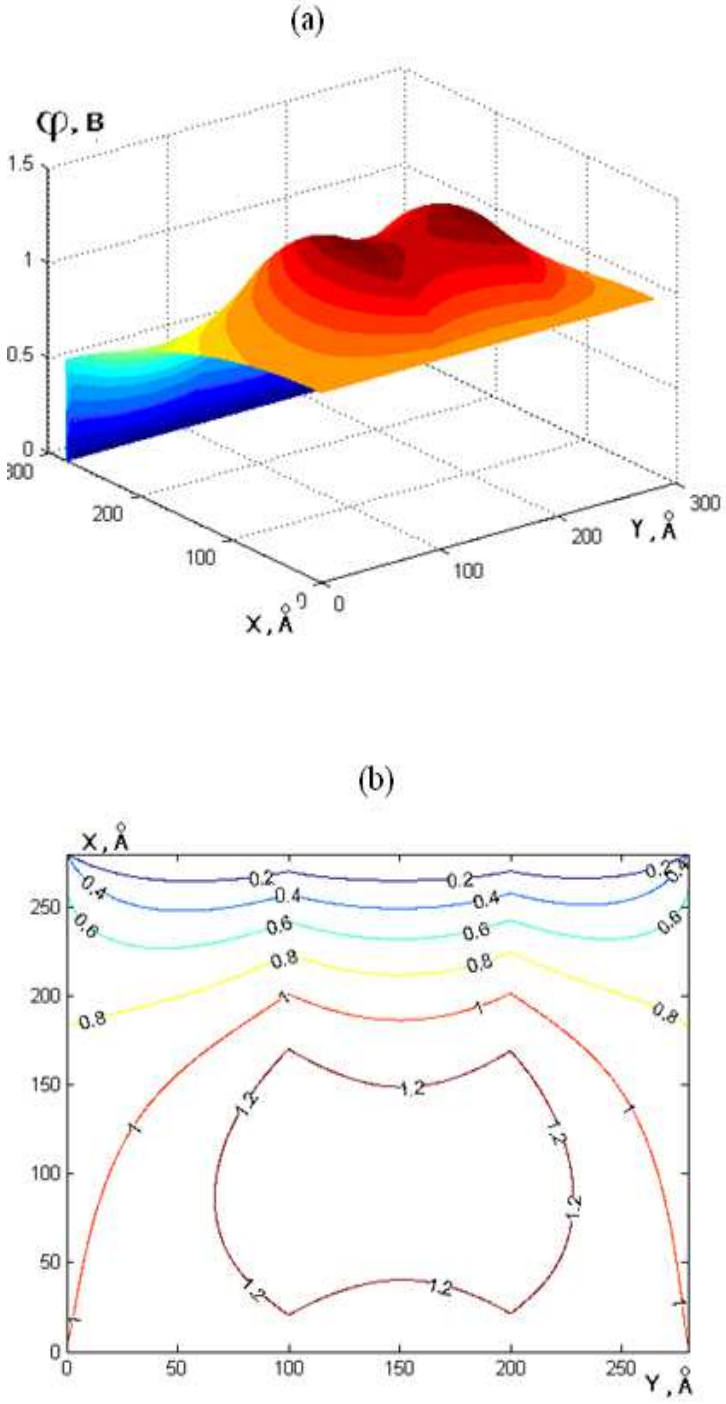

Рис. 4.3. Топологія розподілу електростатичного потенціалу в бар'єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром квантових точок у область просторового заряду (a), еквіпотенціальних ліній в околі квантових точок (b): $\varphi_{BS} = 1B$; $L_d = 40\text{Å}$; $h = 100\text{Å}$; $R_0 = 30\text{Å}$; $N_d = 10^{18}\ см^{-3}$, $N_{QD} = 3 \cdot 10^{10}\ см^{-2}$.

Топологія розподілу еквіпотенціальних ліній (рис. 4.2b, 4.3b) показує, що x − складова напруженості результуючого електричного поля в області просторового заряду між металом і шаром КТ визначається різницею складових електричних полів, створених на межі контакту метал − напівпровідник та на межі контакту КТ − матриця $E_R^x = E_{BS}^x + E_{QD}^x$. У напрямку, паралельному до межі розділу метал – n- напівпровідник, y − складова напруженості результуючого електричного поля має періодичний характер і в площинах $y_n = (2n+1)\frac{h}{2}$ (n=0,1,2…) – $E_R^y = 0$. Зокрема, при значеннях параметрів $\varphi_{BS} = 0.6B$, $L_d = 40\text{Å}$; $h = 100\text{Å}$; $R_0 = 30\text{Å}$; $N_d = 10^{18} см^{-3}$; x − компонента результуючого електричного поля E_R^x поблизу межі метал – n- напівпровідник становить $5.5 \cdot 10^5$ В/см, а поблизу площини КТ – $4 \cdot 10^5$ В/см.

З приведених досліджень розподілу електростатичного потенціалу в бар'єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром квантових точок випливає, що наявність періодично розміщених квантових точок в області просторового заряду приводить до виникнення в напівпровіднику, періодичних n-n+ або p-n переходів.

4.4 Дрейфово-деформаційно-дифузійна модель контакту метал – напівпровідник з вбудованим шаром КТ

Розглядається шарувата структура (рис.4.4): метал – нелегований напівпровідник (i-шар, GaAs) з вбудованим шаром КТ (InAs), який розміщений на відстані $x = L_d$ від поверхні металу та сильно легований напівпровідник (n^+- GaAs).

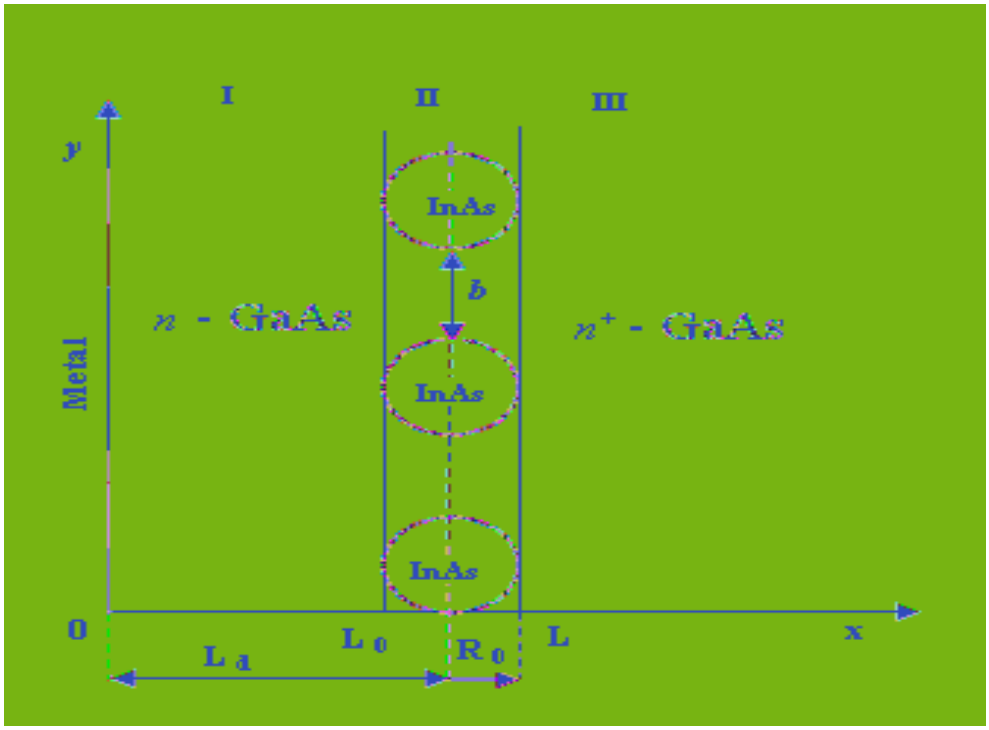

Рис.4.4. Геометрична модель контакту метал – напівпровідник з вбудованим шаром КТ ($b >> R_0$).

Основу дрейфово-деформаційно-дифузійного підходу складає наступна самоузгоджена система рівнянь: для електрохімічного потенціалу, складовими якого є хімічний, електростатичний та деформаційний потенціали; для густини струму; рівняння Пуассона; механічної рівноваги, електронної густини і самоузгоджених граничних умов. Зокрема, для напівпровідникового шару (n-GaAs) рівняння для електрохімічного

потенціалу, густини струму та рівняння Пуассона для 1-ої області $(0 \le x \le L_0)$ мають наступний вигляд:

$$\chi_1(x) = kT \ln\left(\frac{n_1(x)}{N_1}\right) - q\varphi_1(x), \tag{4.10}$$

$$j = \mu n_1(x)\frac{d\chi_1}{dx}, \tag{4.11}$$

$$\frac{dE_1}{dx} = -\frac{q}{\varepsilon_1\varepsilon_0}n_1(x), \tag{4.12}$$

де $\chi_1(x)$–електрохімічний потенціал; $n_1(x)$– концентрація електронів; $N_1 = 2(2\pi m\ kT/h^2)^{\frac{3}{2}}$ – ефективна густина станів; m – ефективна маса електрона; μ – рухливість електронів; $\varphi_1(x)$– електростатичний потенціал; $E_1 = -\frac{d\varphi_1}{dx}$ – напруженість електричного поля на межі метал – напівпровідник; ε_1 – відносна діелектрична проникливість матеріалу напівпровідника; ε_0 – діелектрична стала; q – заряд електрона.

Із (4.10)–(4.11) отримаємо нелінійне рівняння 2-го порядку для напруженості електричного поля у 1-ій області:

$$\frac{kT}{q}E_1^{''} + E_1 \cdot E_1^{'} = -\frac{j}{\mu\varepsilon_1\varepsilon_0}. \tag{4.13}$$

Перейшовши до безрозмірних величин

$$\widehat{E}_1 = \frac{ql}{kT}E_1,\ \widehat{j} = \frac{q^2l^3}{\mu\varepsilon_1\varepsilon_0(kT)^2}j,\ \widehat{x} = \frac{x}{l},\ \widehat{L} = \frac{L}{l},\ \widehat{L}_0 = \frac{L_0}{l},$$

$$l = \sqrt{\frac{2\varepsilon_3\varepsilon_0\chi_0}{3q^2N_3}},\ \chi_0 = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2N_3)^{\frac{2}{3}},$$

та інтегруючи один раз рівняння (4.13), отримаємо :

$$\widehat{E}_1^{'} + \frac{\widehat{E}_1^2}{2} + \widehat{j}\cdot\widehat{x} = A_1, \tag{4.14}$$

де A_1 – стала інтегрування.

Розв'язок рівняння (4.14) виражається через функції Ейрі [146] та їх похідні:

$$\widehat{E}_1(\widehat{x}) = S\frac{Ai'(y_1) + C_1 \cdot Bi'(y_1)}{Ai(y_1) + C_1 \cdot Bi(y_1)}, \tag{4.15}$$

де $S = -2\left[\frac{\widehat{j}}{2}\right]^{\frac{1}{3}}$, C_1 – стала інтегрування, $y_1(\widehat{x}) = \left[\frac{\widehat{j}}{2}\right]^{\frac{1}{3}}\left[\frac{A_1}{\widehat{j}} - \widehat{x}\right]$.

Для шару КТ (InAs) $(L_0 \le x \le L)$ вирази для електрохімічного потенціалу, густини струму та рівняння Пуассона запишуться:

$$\chi_2(x) = E_n - kT\ln\left(\frac{N_2}{n_2(x)} - 1\right) - \Delta_i + a_c^{QD}\varepsilon - q\varphi_2(x), \tag{4.16}$$

$$j = \mu n_2(x)\frac{d\chi_2}{dx}, \tag{4.17}$$

$$\frac{dE_2}{dx} = -\frac{q}{\varepsilon_2\varepsilon_0}n_2(x), \tag{4.18}$$

де $\chi_2(x)$ – електрохімічний потенціал квантових точок; E_n – енергія електрона локалізованого на n- тому рівні в квантовій точці, яка визначається з рівняння Шредінгера з скінченною потенціальною ямою [120]. Зокрема, при $R_0 = 30\text{Å}$, $N_{QD} = 5.5\cdot 10^{10}\,см^{-2}$ (поверхнева густина квантових точок) енергія основного стану електрона E_n рівна 0,372 еВ; $N_2 = N_{QD}\delta(E - E_n)$ – ефективна густина станів в КТ; $n_2(x)$ – концентрація електронів у квантовій точці; Δ_i – розрив зон провідності в точці Γ_6 на межах контакту легований напівпровідник – КТ; a_c^{QD} – константа гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності матеріалу квантової точки; $\varphi_2(x)$ – електростатичний потенціал квантової точки; $E_2 = -\frac{d\varphi_2}{dx}$ – напруженість електричного поля в КТ; ε_2 – відносна діелектрична проникливість матеріалу квантової точки; $\varepsilon = Sp\hat{\varepsilon}^{(i)}$ – параметр

деформації матеріалу КТ ($Sp\hat{\varepsilon}^{(i)} = \varepsilon_{rr}^{(i)} + \varepsilon_{\phi\phi}^{(i)} + \varepsilon_{\theta\theta}^{(i)}$), який визначається через зміщення атомів $u_r^{(i)}$ ($i = 2$), які знаходяться з рівняння рівноваги [120,129]

$$\vec{\nabla}\mathrm{div}\vec{u} = 0 \qquad (4.19)$$

з такими граничними умовами для сферичної КТ [12,129]:

$$\begin{cases} 4\pi R_0^2\left(u_r^{(2)}{}_{|r=R_0} - u_r^{(1)}{}_{|r=R_0}\right) = \Delta V, \\ \sigma_{rr}^{(1)}{}_{|r=R_0} = \sigma_{rr}^{(2)}{}_{|r=R_0} - P_L, \qquad P_L = \dfrac{2\alpha}{R_0}, \\ \sigma_{rr}^{(2)}{}_{|r=R_1} = \sigma_{ef}(N-1), \end{cases} \qquad (4.20)$$

де $u_r^{(i)}$–радіальна компонента зміщення атомів у i-тому напівпровідниковому матеріалі; R_0– радіус КТ; R_1– радіус оточуючої матриці (n- GaAs); $\Delta V = f\,4\pi R_0^3$; f– параметр невідповідності постійних ґраток a_1, a_2 в наноматеріалах InAs і GaAs, відповідно $\left(f = \dfrac{a_1 - a_2}{a_1} \approx 7\%\right)$; P_L– Лапласівський тиск; α– міжфазна поверхнева енергія КТ (InAs); $\sigma_{rr}^{(i)}$ – радіальна складова тензора механічної напруги i-того матеріалу.

Механічні напруги $\sigma_{rr}^{(1)}$ та $\sigma_{rr}^{(2)}$ в матеріалах квантової точки та матриці (n- GaAs) дорівнюють:

$$\sigma_{rr}^{(i)} = \frac{E_i}{(1+\nu_i)(1-2\nu_i)}\left[(1-\nu_i)\varepsilon_{rr}^{(i)} + \nu_i(\varepsilon_{\phi\phi}^{(i)} + \varepsilon_{\theta\theta}^{(i)})\right], \qquad (4.21)$$

де ν_i, E_i– коефіцієнт Пуассона і модуль Юнга i-того матеріалу;

Розв'язок рівняння (4.19) у випадку сферичних КТ має вигляд:

$$u_r^{(1)} = C_1^{(1)} r + \frac{C_2^{(1)}}{r^2}, \qquad 0 \le r \le R_0 \qquad (4.22)$$

$$u_r^{(2)} = C_1^{(2)} r + \frac{C_2^{(2)}}{r^2}, \qquad R_0 \le r \le R_1 \qquad (4.33)$$

Оскільки в т. $r = 0$ зміщення повинно бути скінченим, то в розв'язку (4.22) покладаємо $C_2^{(1)} = 0$.

Поле зміщень визначає наступні компоненти тензора деформації матеріалів КТ і оточуючої матриці (n - GaAs**)** :

$$\varepsilon_{rr}^{(1)} = \varepsilon_{\varphi\varphi}^{(1)} = \varepsilon_{\theta\theta}^{(1)} = C_1^{(1)}, \tag{4.34}$$

$$\varepsilon_{rr}^{(2)} = C_1^{(2)} - \frac{2C_2^{(2)}}{r^3}, \qquad \varepsilon_{\varphi\varphi}^{(2)} = \varepsilon_{\theta\theta}^{(2)} = C_1^{(2)} + \frac{C_2^{(2)}}{r^3}, \tag{4.35}$$

Коефіцієнти $C_1^{(1)}, C_1^{(2)}$, $C_2^{(2)}$ знаходяться з розв'язку системи (4.20) з врахуванням виразів (4.21)–(4.35).

Із (4.16)–(4.18) отримаємо нелінійне рівняння для визначення напруженості електричного поля у КТ:

$$\hat{E}_2' + \frac{\hat{E}_2^2}{2} + \hat{j} \cdot \hat{x} = A_2, \tag{4.36}$$

розв'язок якого має вигляд:

$$\hat{E}_2(\hat{x}) = S \frac{Ai'(y_2) + C_2 \cdot Bi'(y_2)}{Ai(y_2) + C_2 \cdot Bi(y_2)}, \tag{4.37}$$

де C_2 – стала інтегрування, $y_2(\hat{x}) = \left[\frac{\hat{j}}{2}\right]^2 \left[\frac{A_2}{\hat{j}} - \hat{x}\right]$.

У третій області $(L \le x \le \infty)$ шару (n^+ - GaAs) в наближенні Томаса - Фермі рівняння для електрохімічного потенціалу, густини струму та рівняння Пуассона записуємо у формі:

$$\chi_3(x) = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n_3(x))^{\frac{2}{3}} - q\varphi_3(x), \tag{4.38}$$

$$j = \frac{\sigma}{q}\frac{d\chi_3}{dx}, \tag{4.39}$$

$$\frac{dE_3}{dx} = -\frac{q}{\varepsilon_3\varepsilon_0}(n_3(x) - N_3), \tag{4.40}$$

де $\chi_3(x)$ – електрохімічний потенціал; $n_3(x)$ – концентрація електронів; N_3 – концентрація іонізованих донорів; $\varphi_3(x)$ –електростатичний потенціал; σ –

питома електропровідність напівпровідникового шару; $E_3 = -\dfrac{d\varphi_3}{dx}$ – напруженість електричного поля; $\varepsilon_3 = \varepsilon_1 -$ відносна діелектрична проникливість n^+- шару.

Зведемо систему рівнянь (4.38) – (4.40) до наступного виду:

$$l^2 E_3'' - E_3 = -\frac{j}{\sigma}. \qquad (4.41)$$

Розв'язок (4.41) представимо у вигляді:

$$E_3(x) = \left[E_3(L) - \frac{j}{\sigma} \right] \exp\left[\frac{L-x}{l} \right] + \frac{j}{\sigma},\ x \geq L. \qquad (4.42)$$

При $x \to +\infty$, $E_3 = -\dfrac{d\varphi_3}{dx} = 0$, $n_3 = N_3$, $\chi_3 = \chi_0$. Оскільки, III-я область структури (рис.4.4) має високий ступінь легування, тобто провідність σ сильно легованого напівпровідникового шару (III) є достатньо велика, тому в подальшому у формулі (4.42) доданком $\dfrac{j}{\sigma}$ нехтуємо. В результаті, вираз для напруженості електричного поля у III-ій області набуде вигляду:

$$\hat{E}_3(\hat{x}) = \hat{E}_3(\hat{L}) \exp\left[\hat{L} - \hat{x}\right]. \qquad (4.43)$$

Запишемо граничні умови для електрохімічного, електростатичного потенціалів та електростатичної індукції на межах гетероструктури n-GaAs – КТ– n^+-GaAs:

$$\chi_1(L_0) = \chi_2(L_0), \qquad (4.44)$$

$$\chi_2(L) = \chi_3(L), \qquad (4.45)$$

$$\varepsilon_1 \cdot E_1(L_0) = \varepsilon_2 \cdot E_2(L_0), \qquad (4.46)$$

$$\varepsilon_2 \cdot E_2(L) = \varepsilon_3 \cdot E_3(L), \qquad (4.47)$$

$$\varphi_1(L_0) = \varphi_2(L_0), \qquad (4.49)$$

$$\varphi_2(L) = \varphi_3(L), \qquad (4.50)$$

$$\widehat{E}_1'(0) = -\frac{1}{\alpha_1}\exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right), \tag{4.51}$$

де $\alpha_1 = \dfrac{\varepsilon_1\varepsilon_0 kT}{q^2 N_1 l^2}$.

Останню граничну умову отримуємо з прирівнювання електрохімічного потенціалу $\chi_1(0)$ напівпровідника (n-GaAs) на межі з металом до

$$\chi(0) = \chi_0 - qV, \tag{4.52}$$

де V – прикладена напруга; $\Delta = \Delta_i - q\varphi_1(0) - \chi(0)$ – висота потенціального бар'єру на межі напівпровідника з металом.

Прирівнюючи вирази (4.10) і (4.12) при $x = L_0$ (умова (4.44)) з врахуванням (4.12), (4.18) та (4.16) і (4.38) при $x = L$ (умова (4.45)) з врахуванням (4.18), (4.43) і граничної умови (4.47) отримаємо значення похідних напруженості електричного поля $\widehat{E}_1'(\widehat{L}_0)$, $\widehat{E}_2'(\widehat{L})$ в площинах $x = L_0$, $x = L$, відповідно:

$$\widehat{E}_1'(\widehat{L}_0) = \widehat{E}_2'(\widehat{L}_0)\frac{\varepsilon_2 N_1}{\varepsilon_1 N_2} e^{\frac{E_n - \Delta_i + a_c^{QD}\varepsilon}{kT}} = d_1 \widehat{E}_2'(\widehat{L}_0), \tag{4.53}$$

де $d_1 = \dfrac{\varepsilon_2 N_1}{\varepsilon_1 N_2} e^{\frac{E_n - \Delta_i + a_c^{QD}\varepsilon}{kT}}$,

$$\widehat{E}_2'(\widehat{L}) = -\frac{1}{\alpha_2}\exp\left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_3}\widehat{E}_2(\widehat{L}) + \frac{\chi_0 + \Delta_i - a_c^{QD}\varepsilon - E_n}{kT}\right), \tag{4.54}$$

де $\alpha_2 = \dfrac{\varepsilon_2\varepsilon_0 kT}{q^2 N_2 l^2}$.

Отримані вирази з врахуванням рівнянь Пуассона (4.12), (4.18) фактично визначають концентрацію електронів на лівій та правій межах шару КТ контактуючого з n-GaAs та n^+-GaAs.

Крім цього, запишемо вирази для похідних напруженості електричного поля $\hat{E}_1'(\hat{L}_0)$, $\hat{E}_2'(\hat{L}_0)$ в площині $x = L_0$ на основі розв'язків для електричного поля (4.15), (4.37):

$$\hat{E}_1'(\hat{L}_0) = \frac{S^2}{2} y_1(\hat{L}_0) - \frac{\hat{E}_1^2(\hat{L}_0)}{2}, \tag{4.55}$$

$$\hat{E}_2'(\hat{L}_0) = \frac{S^2}{2} y_2(\hat{L}_0) - \frac{\hat{E}_2^2(\hat{L}_0)}{2}, \tag{4.56}$$

де $y_1(\hat{L}_0) = \left[\frac{\hat{j}}{2}\right]^{\frac{1}{3}}\left[\frac{A_1}{\hat{j}} - \hat{L}_0\right]$, $y_2(\hat{L}_0) = \left[\frac{\hat{j}}{2}\right]^{\frac{1}{3}}\left[\frac{A_2}{\hat{j}} - \hat{L}_0\right]$.

Вирази для напруженості електричного поля $\hat{E}_1(\hat{L}_0)$, $\hat{E}_2(\hat{L}\ )$ в площинах $x = L_0$, $x = L$ на основі розв'язку (4.37) з врахуванням граничної умови (4.46) матимуть вигляд, відповідно:

$$\hat{E}_1(\hat{L}_0) = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}\left(S\frac{Ai'(y_2(\hat{L}_0)) + C_2 \cdot Bi'(y_2(\hat{L}_0))}{Ai(y_2(\hat{L}_0)) + C_2 \cdot Bi(y_2(\hat{L}_0))}\right), \tag{4.57}$$

$$\hat{E}_2(\hat{L}\ ) = S\frac{Ai'(y_2(\hat{L})) + C_2 \cdot Bi'(y_2(\hat{L}))}{Ai(y_2(\hat{L})) + C_2 \cdot Bi(y_2(\hat{L}))}, \tag{4.58}$$

де $y_2(\hat{L}) = \left[\frac{\hat{j}}{2}\right]^{\frac{1}{3}}\left[\frac{A_2}{\hat{j}} - \hat{L}\right]$.

Константу C_2 визначаємо із виразу (4.37) для напруженості електричного поля $\hat{E}_2(\hat{L}_0)$ в площині $x = L_0$:

$$C_2\left[\hat{E}_2(\hat{L}), \hat{E}_1(\hat{L}_0), \hat{j}\right] = -\frac{\hat{E}_2(\hat{L}_0)Ai(y_2(\hat{L}_0)) - S \cdot Ai'(y_2(\hat{L}_0))}{\hat{E}_2(\hat{L}_0)Bi(y_2(\hat{L}_0)) - S \cdot Bi'(y_2(\hat{L}_0))}. \tag{4.59}$$

Напруженість електричного поля на лівій межі контакту напівпровідник – КТ $\hat{E}_2(\hat{L}_0)$ визначаємо з (4.36) із врахуванням (4.53) та (4.54):

$$\hat{E}_2(\hat{L}_0) = \pm\sqrt{2A_2 - \frac{S^2}{d_1} y_1(\hat{L}_0) + \frac{1}{d_1}\hat{E}_1^2(\hat{L}_0) - 2\hat{j} \cdot \hat{L}_0}\ . \tag{4.60}$$

Константу $A_1\left[\hat{E}_1(\hat{L}_0),\hat{E}_2(\hat{L}),\hat{j}\right]$ визначаємо із наступного виразу

$$A_1\left[\hat{E}_1(\hat{L}_0),\hat{E}_2(\hat{L}),\hat{j}\right]=\hat{E}_1'(\hat{L}_0)+\frac{\hat{E}_1^2(\hat{L}_0)}{2}+\hat{j}\cdot\hat{L}_0 \qquad (4.61)$$

з врахуванням співвідношень (4.53), (4.58) для похідних напруженості електричного поля $\hat{E}_1'(\hat{L}_0)$, $\hat{E}_2'(\hat{L}_0)$ та граничної умови (4.46):

$$A_1\left[\hat{E}_1(\hat{L}_0),\hat{E}_2(\hat{L}),\hat{j}\right]=\frac{d_1S^2}{2}y_2(\hat{L}_0)+\left(\frac{\varepsilon_2^2}{2\varepsilon_1^2}-\frac{d_1}{2}\right)\hat{E}_2^2(\hat{L}_0)+\hat{j}\cdot\hat{L}_0 \quad .(4.62)$$

Константа A_2 визначається аналогічно, враховуючи умову (4.54):

$$A_2\left[\hat{E}_2(\hat{L}),\hat{j}\right]=\frac{1}{\alpha_2}\exp\left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_3}\hat{E}_2(\hat{L})+\frac{\chi_0+\Delta_i-a_c^{QD}\varepsilon\ -E_n}{kT}\right)+\frac{\hat{E}_2^2(\hat{L}\ )}{2}+\hat{j}\cdot\hat{L}\,. \quad (4.63)$$

Підставляючи знайдені константи A_2, C_2 у вирази для напруженості електричного поля (4.57), (4.58), отримаємо систему трансцендентних рівнянь, розв'язок якої при кожному значенні густини струму $\hat{j}$ дозволяє визначити величину напруженості електричного поля на лівій $\hat{E}_1(\hat{L}_0)$ та правій $\hat{E}_2(\hat{L})$ межах шару КТ:

$$\begin{cases}\hat{E}_1(\hat{L}_0)=\Phi_1(y_2(\hat{L}_0),\hat{j},\hat{E}_1(\hat{L}_0),\hat{E}_2(\hat{L}))\\ \hat{E}_2(\hat{L})=\Phi_2(y_2(\hat{L}),\hat{j},\hat{E}_1(\hat{L}_0),\hat{E}_2(\hat{L})).\end{cases} \qquad (4.64)$$

Прикладену напругу визначаємо із виразу (4.52):

$$qV=q\varphi_1(0)+\chi_0+\Delta-\Delta_i, \qquad (4.65)$$

де $$\varphi_1(0)=\frac{KT}{q}\hat{\varphi}_1(0),\ \hat{\varphi}_1(0)=-2\ln(Ai(y_1(0))+C_1Bi(y_1(0))+C_1^{\ *}. \qquad (4.66)$$

Константа C_1, визначається із виразу (4.15) для напруженості електричного поля $\hat{E}_1(0)$ на межі з металом:

$$C_1=-\frac{\hat{E}_1(0)Ai(y_1(0))-S\cdot Ai'(y_1(0))}{\hat{E}_1(0)Bi(y_1(0))-S\cdot Bi'(y_1(0))}, \qquad (4.67)$$

де $y_1(0) = \left[\frac{\hat{j}}{2}\right]^{\frac{1}{3}}\left[\frac{A_1}{\hat{j}}\right]$.

Напруженість електричного поля на межі метал – напівпровідник ($x = 0$) визначаються із (4.14) з врахуванням граничної умови (4.51):

$$\hat{E}_1(0) = \pm\sqrt{2A_1 + \frac{2}{\alpha_1}\exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)}. \qquad (4.68)$$

Константа C_1^* знаходиться з граничних умов (4.49), (4.50) використавши при цьому вирази для електростатичних потенціалів на лівій та правій межах шару КТ контактуючого з n-GaAs та n^+-GaAs, які отримані на основі формул (4.14), (4.37), (4.44) та граничної умови (4.47):

$$\hat{\varphi}_1(\hat{L}_0) = -2\ln(Ai(y_1(\hat{L}_0)) + C_1 Bi(y_1(\hat{L}_0))) + C_1^*, \qquad (4.69)$$

$$\hat{\varphi}_2(\hat{L}_0) = -2\ln(Ai(y_1(\hat{L}_0)) + C_1 Bi(y_1(\hat{L}_0))) + C_2^*, \qquad (4.50)$$

$$\hat{\varphi}_2(\hat{L}\ ) = -2\ln(Ai(y_2(\hat{L})) + C_2 Bi(y_2(\hat{L}))) + C_2^*, \qquad (4.51)$$

$$\hat{\varphi}_3(\hat{L}) = \hat{E}_3(\hat{L})\exp\left[\hat{L} - \hat{x}\right] = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_3}\hat{E}_2(\hat{L}), \qquad (4.52)$$

$$C_1^* = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_3}\hat{E}_2(\hat{L}) - 2\ln\left(\frac{Ai(y_2(\hat{L}_0)) + C_2 \cdot Bi(y_2(\hat{L}_0))}{Ai(y_2(\hat{L})) + C_2 \cdot Bi(y_2(\hat{L}))}\right) +$$

$$+ 2\ln Ai(y_1(\hat{L}_0)) + C_1 \cdot Bi(y_1(\hat{L}_0)) \qquad (4.53)$$

Тоді, з врахуванням зв'язку $\hat{j}$ і $\hat{E}_1(\hat{L}_0), \hat{E}_2(\hat{L})$ та формули (4.65) функціональна залежність густини струму $\hat{j}$ від прикладеної напруги V до структури (ВАХ) буде описуватися наступним співвідношенням:

$$V = \frac{KT}{q}\cdot\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_3}\hat{E}_2(\hat{L}) + (\chi_0 + \Delta - \Delta_i)/q - \frac{KT}{q}\cdot 2\ln\left(\frac{Ai(y_1(0)) + C_1 \cdot Bi(y_1(0))}{Ai(y_1(\hat{L}_0)) + C_1 \cdot Bi(y_1(\hat{L}_0))}\times\right.$$

$$\left.\times\frac{Ai(y_2(\hat{L}_0)) + C_2 \cdot Bi(y_2(\hat{L}_0))}{Ai(y_2(\hat{L})) + C_2 \cdot Bi(y_2(\hat{L}))}\right). \qquad (4.54)$$

4.5 Вольт-амперна характеристика (ВАХ) поверхнево-бар'єрної структури виду Шотткі з вбудованим шаром КТ в межах дрейфово-деформаційно-дифузійного підходу з врахуванням самоузгоджених граничних умов

Числові розрахунки ВАХ проведені на основі формули (4.54) для структури метал – нелегований напівпровідник (i-шар, GaAs) з вбудованим шаром КТ (InAs) – сильно легований n^+- GaAs з наступними параметрами: $R_1 = 500\text{Å}$, $R_0 = 30\text{Å}$, $\alpha = 0.657 H/м$, $m = 0.065 m_0$, $\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = 13$, $\varepsilon_2 = 15$, $\mu = 4000 \frac{см^2}{B \cdot c}$, $N_3 = 3 \cdot 10^{18} см^{-3}$, $\Delta_i = 0.83\,\text{eB}$.

На рис. 4.5 приведено результати числових розрахунків ВАХ для прямого напрямку зміщення при двох значеннях висоти потенціального бар'єру на межі напівпровідника з металом ($\Delta = 0.5eB, 0.9eB$).

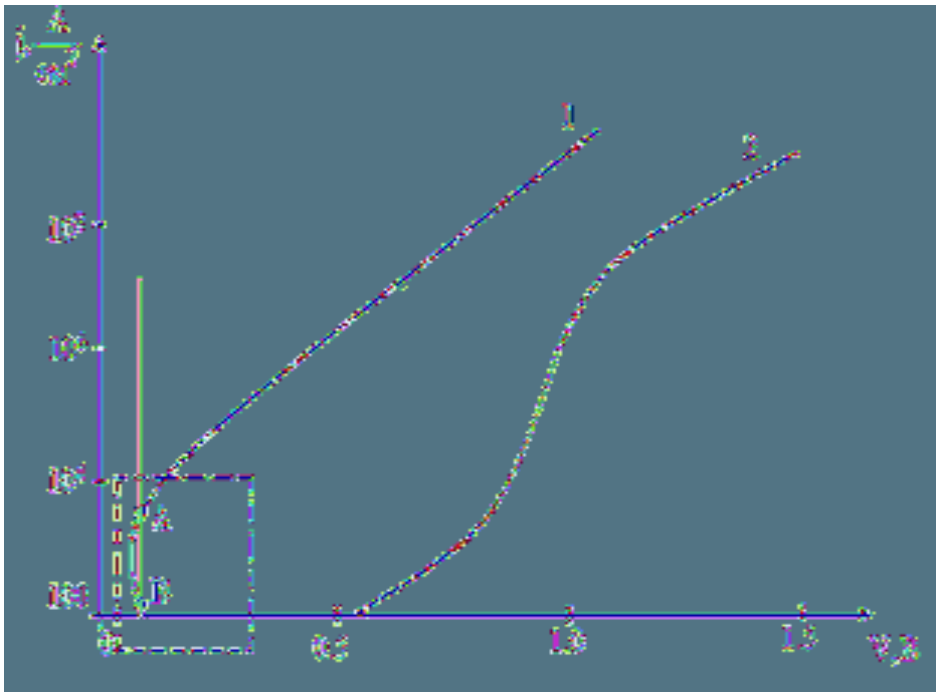

Рис.4.5. Розрахунок ВАХ для прямого напрямку зміщення при висоті бар'єра Δ: 1 - 0.5eB, 2 – 0.9eB і $T = 300K$, $L_d = 50\text{Å}$, $R_0 = 30\text{Å}$.

Як видно, ВАХ низькобар'єрного ($\Delta \le 0.5eB$) діода Шотткі з вбудованим шаром КТ в область просторового заряду ($L_d \le 50Å$) має S - подібний характер, що підтверджується на експерименті [3,113]. Такий S - подібний характер ВАХ зумовлений процесами зарядки діркових та електронних станів КТ та впливом накопиченого заряду на розподіл потенціалу по структурі. Ці ефекти слід брати до уваги при проектуванні детекторів, лазерів чи генераторів, що використовують КТ. Із збільшенням висоти бар'єру Δ до 0.9еВ (рис.4.5, крива 2) на ВАХ зникає ділянка (АВ) від'ємного диференційного опору, і в інтервалі напруг 0.5В-1В ВАХ має експоненційний характер, тобто контактні явища стають визначальними [147].

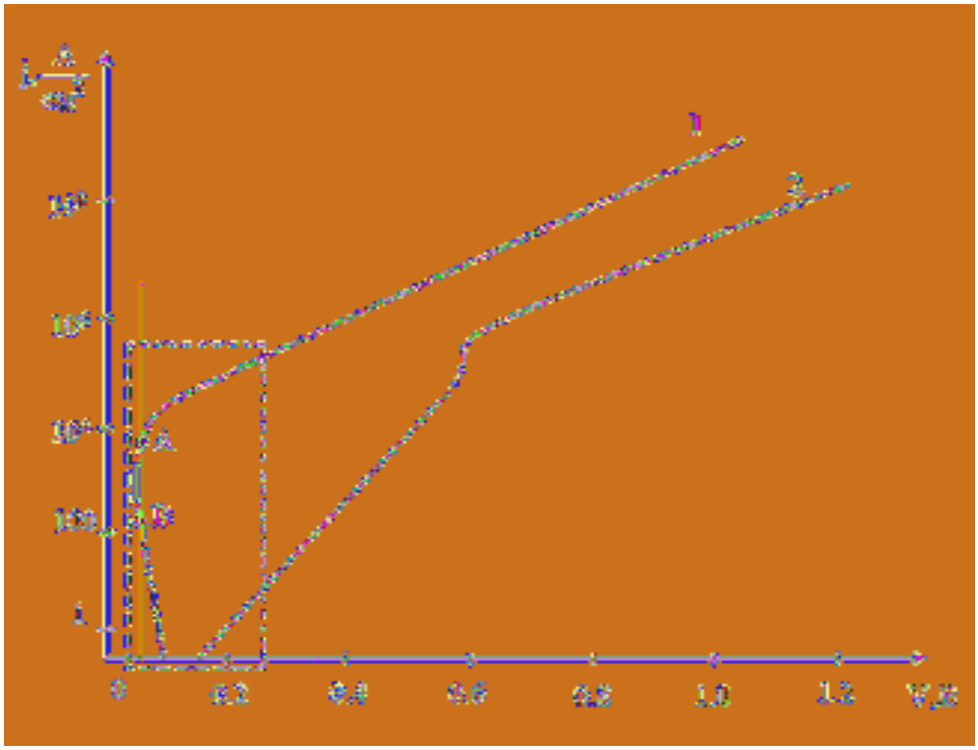

Рис.4.6. Розрахунок ВАХ для L_d: 1 - 50Å, 2 - 150Å і $R_0 = 30Å$, $T = 300K$, $\Delta = 0.5eB$.

Варіювання товщини i-шару ($L_0 = L_d - R_0$) від 50Å-150Å приводить до менших значень густини струму j $\sim \frac{1}{L^3}$ [104] та до зміни характеру ВАХ (рис.4.6, криві 1,2), тобто зникає струмова бістабільність S-типу. Крім цього,

як видно із ВАХ (рис.4.6, крива 2) при напрузі ~ 0.6В спостерігається різке зростання струму. Це імовірно зумовлено тим, що при цій напрузі починається тунелювання через електронні рівні КТ. При більших напругах (V>0.6В) характер ВАХ наближається до квадратичної залежності, яка характерна для струмів обмежених просторовим зарядом .

На рис.4.7 приведено результати числових розрахунків ВАХ для прямого напрямку зміщення при двох значеннях температури (Т=77К, 300К).

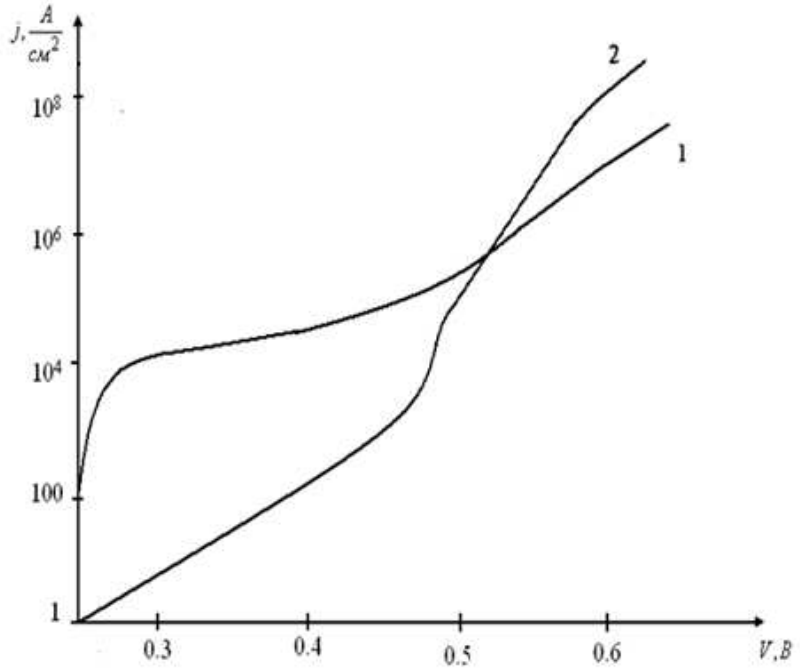

Рис.4.7. Розрахунок ВАХ при Т: 1 - 300К, 2 – 77К і $R_0 = 20Å$,

$\Delta = 0.5eB$, $L_d = 150Å$

Як видно, з графіків ВАХ, в інтервалі напруг $0.24B < V < 0.52B$ значення густини струму від напруги при Т=77К є меншим ніж при Т=300К. Зокрема при Т=77К характер струмопереносу описується експоненційною залежністю ($j \propto \exp(-\frac{\Delta}{KT} + \frac{qV}{KT})$ [106]) і більш визначається потенціальним бар'єром Δ, ніж при Т=300К. Для температур (Т=77К,Т=300К) при напрузі V=0.52В вітки ВАХ приймають одне і теж значення густини струму.

Висновки до розділу

1. Показано, що вздовж напрямку розміщення квантових точок (OY) в області просторового заряду діода Шотткі електростатичний 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 $\varphi = \varphi(x, y = \text{const})$, яка при $\frac{x}{L_d} >> 1$ асимптотично спадає за експоненційним законом.
2. Встановлено, що вольт-амперна характеристика низькобар'єрного ($\Delta \le 0.5eB$) діода Шоткі з вбудованим шаром квантових точок в область просторового заряду має S-подібний характер за умови, коли шар квантових точок знаходиться на відстанях від межі контакту метал-напівпровідник порядку (10-30)a_0, де a_0– період гратки напівпровідника.
3. Показано, що як із збільшенням висоти бар’єру Δ від 0.5еВ до 0.9еВ , так і відстані від металу до шару КТ (L_d) від 50Å до 150Å на ВАХ зникає ділянка (АВ) від’ємного диференційного опору.
4. При високих потенціальних бар’єрах (0.9еВ) контактні явища домінують, і на ВАХ присутня ділянка з експоненційною залежністю від напруги (0.5В – 1В), а при низьких – залежність струму від напруги наближається до квадратичної (V>0.6В).

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ І 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 Шотткі (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 ($R_0 = 100 Å$) 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 потенціальні ямі з таким же спотворенням її форми.
4. Встановлено, що аксіально-симетричне збурення сферичної форми квантової точки InAs і деформація її матерілу 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 $In_xGa_{1-x}As$, який збіднюється точковими дефектами виду центрів стиску, коли внутрішній шар гетероструктури $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs$ 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 $\frac{N_{d0}^{(i)}}{N_{dc}^{(i)}}(\mathrm{i}=1,2,3)$ і деформаційний параметр β становлять 0.5, 0.8, 0.6 та 10.2, відповідно, показано: якщо товщина середнього шару $In_xGa_{1-x}As$ наногетеросистеми $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs$ становить $a = 0.05L$, то встановлена концентрація вакансій $\frac{N_{d0}^{(2)}(\bar{z},5\tau^{(2)})}{N_{dc}^{(2)}}$ 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 $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs$ 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 $\varphi = \varphi(x, y = \text{const})$, яка при $\frac{x}{L_d} >> 1$ асимптотично спадає за експоненційним 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 ($\Delta \le 0.5eB$) 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 гратки напівпровідника), тоді як із збільшенням висоти бар'єру Δ від 0.5еВ до 0.9еВ, так і відстані від металу до шару квантових точок ($L_d > 10a_0$) S-подібний характер ВАХ зникає.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

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. Пелещак Р.М. Самоорганізований дифузійно-деформаційний розподіл точкових дефектів у напружених гетеросистемах / Р.М. Пелещак, 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. Вакуленко О.В. Вплив дефектних станів інтерфейсу на фотоелектричні властивості гетероструктур $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ з квантовими точками/ О.В. Вакуленко, С.Л. Головинський, С.В. Кондратенко // УФЖ.– 2011.– Т.56, №9. – С.944–951.
6. Ландау Л.Д. Теория упругости / Л.Д.Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Наука, 1965. – 204 с.
7. Downes J.R. A simple method for calculating strain distributions in quantum dot structures / J.R. Downes, D.A. Faux, E.P. O'Reilly // J. Appl. Phys. – 1997.– V. 81, № 10. – P. 6700–6702.
8. Pearson G.S. Analytical solutions for strain in pyramidal quantum dots / G.S. Pearson, D.A. Faux // J. Appl. Phys.– 2000.– V. 88, № 2.– P. 730–736.
9. Лифшиц И.М. О построении тензора Грина для основного уравнения теории упругости в случае неограниченной упруго-анизотропной среды / И.М. Лифшиц, Л.Н. Розенцвейг // ЖЭТФ.– 1947.– Т. 17, №9.– С.783–791.

10. Faux D.A. Green’s tensors for anisotropic elasticity: Application to quantum dots / D.A. Faux, G.S. Pearson //Phys. Rev.B. – 2000.–V.62, № 8. – P. R4798–4801.
11. Strain distributions in quantum dots of arbitrary shape / A.D. Andreev, J.R. Downes, D.A. Faux [et al.] // J. Appl. Phys.–1999.– V. 86, № 1.– P. 297–305.
12. Излучение света полупроводниковой структурой с квантовой ямой и массивом квантовых точек / В.П. Евтихиев, О.В. Константинов, А.В. Матвеенцев, А.Е. Романов // ФТП. – 2002. – Т.36, № 1. – С.79–85.
13. Musgrave M.J. A general valence force field for diamond / M.J. Musgrave, J.A. Pople // Proc. Roy. Soc. A. – 1962. – V. A 268, № 1335.– P. 474–484.
14. Ненашев А.В. Пространственное распределение упругих деформаций в структурах Ge/Si с квантовыми точками / А.В.Ненашев, А.В. Двуреченский // ЖЭТФ. – 2000.– Т.118,№3.– С. 570–578.
15. Grundmann M. InAs/GaAs pyramidal quantum dots: Strain distribution, optical phonons, and electronic structure / M. Grundmann, O. Stier, D. Bimberg // Phys. Rev. B. – 1995.– V. 52, № 16.– P. 11969–11981.
16. Keating P.N. Effect of Invariance Requirements on the Elastic Strain Energy of Crystals with Application to the Diamond Structure / P.N. Keating // Phys. Rev.– 1966.– V. 145, № 2.– P. 637–645.
17. Cusack M.A. Electronic structure of InAs/GaAs self-assembled quantum dots / M.A. Cusack, P.R. Briddon, M. Jaros // Phys. Rev. B.– 1996.– V. 54, № 4. – P. 2300–2303.
18. Saito T. Electronic structure of piezoelectric In0.2Ga0.8N quantum dots in GaN calculated using a tight-binding method / T. Saito, Y. Arakawa // Physica E. – 2002.– V. 15. – P. 169–181.
19. Molecular-dynamics investigation of the surface stress distribution in a Ge/Si quantum dot superlattice / I. Daruka, A.-L. Barabasi, S.J. Zhou [et al.] // – Phys. Rev. B. – 1999.– V. 60, № 4.– P. R2150–2153.

20. Kikuchi Y. Strain profiles in pyramidal quantum dots by means of atomistic simulation / Y. Kikuchi, H. Sugii, K. Shintani // J. Appl. Phys.– 2001. V. 89, № 2. – P. 1191–1196.
21. Stier O. Electronic and optical properties of strained quantum dots modeled by 8-band k·p theory / O. Stier, M. Grundmann, D. Bimberg // Phys. Rev. B.– 1999.– V. 59, № 8.– P. 5688–5701.
22. Strain and composition profiles of self-assembled Ge/Si (001) islands / M.I. Alonso, M. de la Calle, J.O. Osso [et al.] // J. Appl. Phys. – 2005. – V.98. – C. 033530-1– 033530-6.
23. Raman study of self-assembled SiGe nanoislands grown at low temperatures / M.Ya. Valakh, V.O. Yukhymchuk, V.M. Dzhagan [et al.] // Nanotechnology. – 2005. – V.16. – P. 1464.
24. Курилюк В.В. Пружні деформації в SiGe-гетероструктурах з квантовимиточками неоднорідного складу / В.В. Курилюк // Ukr. J. Phys. – 2013. – V.58,№8. – С. 782–788 .
25. Di Carlo A. Organic and Inorganic Nanostructures: An Atomistic Point of View / A. Di Carlo. // Phys. Stat. Sol. B. – 2002. – V.232, № 1. – P.5–12.
26. Electron-phonon interaction in semiconductor spherical quantum dot embedded in a semiconductor medium (HgS/CdS) /M. Tkach, V. Holovatsky, O. Voitsekhivska [et al.] // Phys. Stat. Sol. B. – 2001. – V.225, № 2. – P.331–342.
27. Покутний С.И. Экситон в квазинульмерных структурах / С.И. Покутний // ФТТ. – 1996. – Т.38, № 2. – С.512–521.
28. Quantum-dot quantum well CdS/HgS/CdS: Theory and experiment/ D. Schooss, A. Mews, A. Eychmüller, H. Weller // Phys.Rev.B. – 1994. – V.49, № 24. – P.17072–17078.
29. Електронний спектр сферичної наногетеросистеми CdS/HgS/H_2O/ М.В. Ткач, В.А. Головацький, О.М. Войцехівська, М.Я. Мінькова // УФЖ. – 1998. – Т.43, № 5. – С.617–622.

30. Спектр електронів і дірок у сферичних наноструктурах / М.В. Ткач, В.А. Головацький, О.М. Войцехівська [та ін.] // Журн.фіз.досл. – 2000. – Т.4, № 3. – С.342–349.
31. Головацький В.А. Електронний і дірковий спектри періодичних сферичних наногетероструктур з внутрішнім бар'єром/В.А. Головацький // Журн.фіз.досл. – 1998. – Т.2, № 4. – С.583–585.
32. Marin J.L. Confinement of excitons in spherical quantum dots / J.L. Marin, R. Riera, S.A. Cruz // J.Phys.:Condens.Matter. – 1998. – V.10, № 6. – P.1349-1361.
33. Reimann S.M. Electronic structure of quantum dots / S.M. Reimann, M. Manninen // Rev. Mod. Phys. – 2002. – V.74, № 4. – P.1283–1342.
34. Зейф А.П. Применение полуэмпирических методов МО ЛКАО к расчету кластерных моделей полупроводников и диэлектриков. Элементарные физико-химические процессы на поверхности монокристаллических полупроводников / А.П. Зейф . – Новосибирск.: Наука, 1975. – С.6–39.
35. Method for tight-binding parametrization: Application to silicon nanostructures / Y.M. Niquet, C. Delerue , G. Allan , M. Lannoo // Phys. Rev. B. – 2000. – V.62, № 8. – P.5109–5116.
36. Ren S.Y. Hydrogenated Si clusters: Band formation with increasing size / S.Y. Ren, J.D. Dow // Phys. Rev. B. – 1992. – V.45, № 12. – P.6492–6496.
37. Delerue C. Theoretical aspects of the luminescence of porous silicon / C. Delerue, G. Allan, M. Lannoo // Phys. Rev. B. – 1993. – V.48, № 15. – P.11024–11036.
38. Leung K. Electron-hole interactions in silicon nanocrystals / K. Leung, K.B. Whaley // Phys. Rev. B. – 1997. – V.56, № 12. – P.7455–7468.
39. Hill N.A. Size Dependence of Excitons in Silicon Nanocrystals / N.A. Hill, K.B. Whaley // Phys. Rev. Lett. – 1995. – V.75, № 6. – P.1130–1133.

40. Delerue C. Excitonic and Quasiparticle Gaps in Si Nanocrystals / C. Delerue, M. Lannoo, G. Allan // Phys. Rev. Lett.– 2000.– V.84,№ 11. – P.2457–2460.
41. Ogut S. Quantum Confinement and Optical Gaps in Si Nanocrystals / S. Ogut, J.R. Chelikowsky, S.G. Louie // Phys. Rev. Lett. – 1997.–V.79,№ 9.– P.1770–1773.
42. Franceschetti A. Pseudopotential calculations of electron and hole addition spectra of InAs, InP, and Si quantum dots / A. Franceschetti, A. Zunger // Phys. Rev. B. – 2000. – V.62, № 4. – P.2614–2623.
43. Wang L.-W. Solving Schrödinger's equation around a desired energy: Application to silicon quantum dots / L.-W. Wang, A. Zunger // J. Chem. Phys. – 1994. – V.100, № 3. – P.2394–2397.
44. Delley B. Size dependence of band gaps in silicon nanostructures / B. Delley, E.F. Steigmeier // Appl. Phys. Lett. – 1995. – V.67, № 16. – P.2370–2372.
45. Мещеряков В.В. Деформационные состояния в нанокристаллах / В.В.Мещеряков // ФТТ. – 2000. – Т.42,№9. –С.1700–1706.
46. Ланно М. Точечные дефекты в полупроводниках / М. Ланно, Ж. Бургуэн. – М.: Мир, 1984. – 264с.
47. Influence of the size dispersion on the emission spectra of the Si nanostructures / J.B. Khurgin, E.W. Forsythe, G.S. Tompa, B.A. Khan // Appl. Phys. Let. – 1996. – V.69, №9. – P.1241–1243.
48. Бурдов В.А. Зависимость ширины оптической щели кремниевых квантовых точек от их размера / В.А. Бурдов // ФТП. – 2002. – Т.36, № 10. – С.1233–1236.
49. Пелещак Р.М. Спектр электронов и дырок в квантовой точке InAs, перенормированной деформацией / Р.М. Пелещак, О.О. Даньків // Письма в ЖТФ. – 2005. – Т.31,№16.– С.33–41.

50. Electronic structure of self-assembled InAs quantum dots in GaAs matrix / P.N. Brounkov, A. Polimeni, S.T. Stoddart [et al] // Appl. Phys. Let. – 1998. – V.73, № 8. – P.1092–1094.
51. Electron and hole energy levels in InAs self-assembled quantum dots / G. Medeiros-Ribeiro, D. Leonard, P.M. Petroff // Appl. Phys. Lett. – 1995. – V.66, № 14. – P.1767–1769.
52. Синявский Э.П. Исследования подвижности в низкоразмерных системах в постоянном поперечном электрическом поле /Э.П. Синявский, С.А. Карапетян // Физика и техника полупроводников. – 2011. – Т. 45, №8. – С. 1062–1064 .
53. Погребняк В.А. Поверхностные электронные состояния на неровной границе раздела двух сред / В.А. Погребняк, В.М. Яковенко, І.В. Яковенко // ФТТ. – 1997. – Т.39,№10. – С.1875–1878.
54. Морс Ф.М. Методы теоретической физики / Ф.М. Морс, Г. Фешбах. – М.: ИЛ, 1958.– Т.1. – 931 с.
55. Ландау Л.Д. Квантовая механика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Физматлит, 2002. – 500 с.
56. Мигдал А.Б. Качественные методы в квантовой теории / А.Б. Мигдал. – М.: Наука, 1975. – 335 с.
57. Forestiere C. The role of nanoparticle shapes and deterministic aperiodicity for the design of nanoplasmonic arrays / C. Forestiere, G. Miano, S. Boriskina, L. Negro // Opt.Express. – 2009.– V.17,№12.– P.9648–9661.
58. Kim K.-H. Linear and nonlinear optical characteristics of composites containing metal nanoparticles with different sizes and shapes / K.-H. Kim, A. Husakou, J. Herrmann // Opt. Express. – 2010.– V.18, №7. – C 7488 –7496.
59. Kulchin Yu. N. Threshold optical nonlinearity of dielectric nanocomposite / Yu.N. Kulchin, V.P. Dzyuba, S.S. Voznesenskiy // Advances in Diverse Industrial Applications of Nanocomposites. –2011.– C. – 261–288.

60. Interface roughness scattering in thin, undoped GaInP/GaAs quantum wells / W.C. Mitchel, G.J. Brown, I. Lo [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1994. –V. 65. – 1578 .
61. Taguchi T. Interface properties and the effect of strain of ZnSe/ZnS strained-layer superlattices / T. Taguchi, Y. Kawakami, Y. Yamada // Physica B: Condensed Matter. – 1993. – V. 191.– P. 23–44.
62. Леденцов Н.Н. Люминесценция локализованных электронно-дырочных пар в области фундаментального поглощения структур Zn(S,Se)-(Zn,Cd)Se с квантовыми ямами / Н.Н.Леденцов, С.В.Иванов, В.М.Максимов [та ін.] // ФТП. – 1995. – Т. 29, №65 . – С.65
63. Легирование слоев GaAs кремнием в условиях низкотемпературной молекулярно-лучевой эпитаксии / М.Д. Вилисова, А.Е. Куницын, Л.Г. Лаврентьева [та ін.] // ФТП. – 2002. – Т.14, № 11. – С.3157–3161.
64. Структура и свойства слоев InGaAs, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии при низкой температуре / М.Д. Вилисова, И.В. Ивонин, Л.Г. Лаврентьева [та ін.] // ФТП. – 1999. – Т.33, № 8. – С.900–905.
65. Титов А.И. Роль механических напряжений при легировании материалов с помощью ионных пучков / А.И. Титов. – М., 1983. – 16 с.
66. Титов А.И. Профили распределения внедренной примеси при больших дозах имплантационного легирования / А.И. Титов // ЖТФ. – 1979. – Т.49, № 4. – С.844–849.
67. Макарец Н.В. Распыление поверхности мишени и радиационно-стимулированная диффузия примеси / Н.В. Макарец, Г.Л. Фалько, А.М. Федорченко // Поверхность. – 1984. – № 5. – С.29–34.
68. Фалько Г.Л. Модель деформаційного перерозподілу і стаціонарні профілі концентрації імплантованої домішки / Г.Л. Фалько, С.Г. Шпирко // УФЖ. – 1995. – Т.40, № 10. – С.1115–1118.

69. Банишев А.Ф. Инициируемая лазерным воздействием аномальная диффузия кислорода в обогощенном дефектами поверхностном слое кремния / А.Ф. Банишев, В.С. Голубев, А.Ю. Кремнев // Письма в ЖТФ. – 2000. – Т.26, № 2. – С.8–12.
70. Влияние рассогласования параметров решеток на структурные, оптические и транспортные свойства слоев InGaAs, выращиваемых методом молекулярно-пучковой эпитаксии на подложках InP (100) / Жуков А.Е., Егоров А.Ю., Устинов В.М. [та ін.] // ФТП. – 1997. – Т.31, № 1. – С.19–22.
71. Chang Y.-L. Study of hydrogenation on near-surface strained and unstrained quantum wells / Y.-L. Chang, I.-H. Tan, E. Hu [et al] // J. Appl. Phys. – 1994. – V.75, № 6. – P.3040–3044.
72. Lord S.M. Hydrogen passivation of nonradiative defects in InGaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ quantum wells / S.M. Lord, G. Roos, J.S. Harris, N.M. Johnson // J. Appl. Phys. – 1993. – V.73, № 2. – P.740–748.
73. Chen Y.C. Suppression of defect propagation in semiconductors by pseudomorphic layers /Y.C. Chen, J. Singh, P.K. Bhattacharya // J.Appl.Phys. – 1993. – V.74, № 6. – P.3800–3804.
74. Карпович И.А.Образование и пассивация дефектов в гетероструктурах с напряженными квантовими ямами GaAs/InGaAs при обработке в водородной плазме / И.А. Карпович, А.В. Аншон, Д.О. Филатов // ФТП. – 1998. – Т.32, № 9. – С.1089–1093.
75. Облучение высокоэнергетическими электронами и γ - квантами эпитаксиальных пленок КРТ, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии / А.В. Войцеховский, А.П. Коханенко, А.Г. Коротаев, [та ін.] // Прикладная физика. – 2003. – № 5. – С.99–101.
76. Винценц С.В. О порогах возникновения неупругих деформацій в поверхностных слоях Si и GaAs при многократном импульсном

лазерном облучении / С.В. Винценц, А.В. Зотеев, Г.С. Плотников // ФТП. – 2002. – Т.36, № 8. – С.902–906.

77. Винценц С.В. Самоорганизация лазерноиндуцированных точечных дефектов на начальных стадиях неупругих фотодеформаций германия / С.В. Винценц, А.В. Зайцева, Г.С. Плотников // ФТП. – 2003. –Т.37, № 2. – С.134–141.
78. Бобиль А.В. Рентгенодифракционные и электронно-микроскопические исследования влияния γ-излучения на многослойные гетероструктуры AlGaAs/InGaAs/GaAs / А.В. Бобиль, А.А. Гуткин, П.Н. Брунков [та ін.] // ФТП. – 2006. – Т. 40,№6.– С.707–710.
79. Pease R.L. Total ionizing dose effects in bipolar devices and circuits / R.L. Pease // IEEE Transactions on Nuclear Science. – 2003. – Vol.50, № 3. – P.539–551.
80. Electrical, spectral, and chemical properties of 1.8 MeV proton irradiated AlGaN/GaN HEMT structures as a function of proton fluence / B.D. White , M. Bataiev, S.H. Goss [et al] // IEEE Transactions on Nuclear Science. – 2003. – Vol.50, № 6. – P.1934–1941.
81. Virt I.S. Effect of thermal neutron irradiation effect on the electrophysical and photoelectrical properties of $Hg_{0,8}Cd_{0,2}Te$ / I.S. Virt, V.V. Gorbunov // Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics. – 2000. – V.3, № 1. – P. 35–38.
82. Михайловский В.В. Образование сверхрешеток плотности дефектов в бинарных соединениях при ядерном облучении / В.В. Михайловский , К.С. Расселл , В.И. Сугаков // ФТТ. – 2000. – Т.42, № 3. – С.471–477.
83. Емельянов В.И. Самоорганизация упорядоченных дефектно-деформационных микро- и наноструктур на поверхности твердых тел под действием лазерного излучения / В.И. Емельянов // Квантовая электроника. – 1999. – Т.28, № 1. – С.2–18.

84. Мирзоев Ф.Х. Деформационная неустойчивость и генерация поверхностных упорядоченных структур при лазерном воздействии / Ф.Х. Мирзоев // Квантовая электроника.– 1996. – Т.23, № 9. – С.827–830.
85. Emel'yanov V.I. Generation-diffusion-deformational instabilities and formation of ordered defect structures on surfaces of solids under the action of strong laser beams / V.I. Emel'yanov // Laser Physics. – 1992. – Vol.2, № 4. – P.389–466.
86. Walgraef D. Deformation patterns in thin films under uniform laser irradiation /D. Walgraef, N.M. Ghoniem, J. Lauzeral // Phys. Rev. B – 1997. – V.56, №23. – P.15361–15377.
87. Lauzeral J. Rose deformation patterns in thin films irradiated by focused laser beams / J. Lauzeral, D. Walgraef, N.M. Ghoniem // Phys. Rev. Lett. – 1997. – Vol.79, № 14. – P.2706–2709.
88. Герасименко Н.Н. Наноразмерные структуры в имплантированных полупроводниках / Н.Н. Герасименко // Рос.хим.ж. – 2002. – Т.46, № 5. – С.30–41.
89. Brounkov P.N. Simulation of the capacitance–voltage characteristics of a single-quantum-well structure based on the self-consistent solution of the Schrödinger and Poisson equations / P.N. Brounkov, T. Benyattou, G. Guillot // J. Appl. Phys. – 1996. – V.80, № 2. – P.864–871.
90. Sikka V.K. Damage in neutron-irradiated molybdenum (I). Characterization of as-irradiated microstructure / V.K. Sikka, J. Moteff // J. Nucl. Mat. – 1974. – V.54, № 2. – P.325–345.
91. Емельянов В.И. Образование нанометровых упорядоченных дефектно-деформационных структур в твердых телах при воздействии на них потоков энергии / В.И. Емельянов, И.М. Панин // ФТТ. – 1997. – Т.39, № 11. – С.2029–2035.

92. Emel’yanov V.I. A Hierarchy of the formation of nanometer clusters and periodic structures of laser-indused defects / V.I. Emel’yanov, I.M. Panin // Laser Physics. – 1996. – V.6, № 5. – P.971–978.
93. Куликов Г.С. Взаимодействие атомной и электронно-дырочной подсистем и роль точечных дефектов при диффузии в полупроводниках /Г.С. Куликов, Р. Ш. Малкович // ФТП. – 1995. – Т.29,№ 5. – С.937–944.
94. Болтакс Б.И. Диффузия в полупроводниках / Б.И. Болтакс.– М.: Физматгиз, 1961. – 462с.
95. Болтакс Б.И. Диффузия и точечные дефекты в полупроводниках / Б.И. Болтакс.– Ленингр.: Наука, 1972. – 310с.
96. Стасюк І.В. Заповнення електронних станів і деформація гратки металу в околі межі поділу областей з різними механічними напруженостями / І.В. Стасюк, Р.М. Пелещак // УФЖ. – 1991. – Т.36, № 11. – С.1744–1749.
97. Пелещак Р.М. Влияние эффекта рассеяния на электронную плотность и деформацию решетки в окрестности границы областей полупроводника с различными механическими напряжениями / Р.М. Пелещак, И.В. Стасюк. – К., 1990. – 20с.
98. Стасюк І.В. Деформаційні і електронні стани напівпровідника поблизу межі поділу областей з різними механічними напруженостями / І.В. Стасюк, Р.М. Пелещак // УФЖ. – 1994. – Т.39, № 7. – С.856–861.
99. Lukiyanets B.A. Magnetodeformation effects in a crystal lattice / B.A. Lukiyanets, R.M. Peleshchak // Condensed Matter Physics. – 1999. – Vol.2, № 1. – P.89–92.
100. Григорчук Р.А. Электрон-деформационное взаимо-действие и сжатие решетки в кристаллах, описываемых моделью Хаббарда / Р.А. Григорчук, И.В. Стасюк // УФЖ. – 1980. – Т.25, № 3. – С.404–410.
101. Пелещак Р.М. Электронное перераспределение в окрестности ядра линейной дислокации / Р.М. Пелещак, Б.А. Лукиянец // Письма в журнал технической физики. – 1998. – V.24, № 2. – С. 37–41.

102. Пелещак Р.М. Енергетичний спектр електронів у тришаровій гетеросистемі із самоорганізованими дефектно-деформаційними структурами / Р.М. Пелещак, О.В. Кузик, О.О. Даньків // Український фізичний журнал. – 2003. – Т. 48. – № 9. – С.991–995.
103. Родерик. Э.Х. Контакты металл-полупроводник / Э.Х. Родерик. – М.: Радио и связь, 1982. –210с.
104. Шашкин В.И. Вольт-амперная характеристика контакта металл-полупроводник с барьером Мота / В.И.Шашкин, А.В.Мурель // ФТТ.– 2008.–Т.50,№3.– С.519–522.
105. Солдатенков Ф.Ю. Управление временем жизни носителей заряда в высоковольтных p-i-n диодах на основе гетероструктур InxGa1-xAs/GaAs / Ф.Ю. Солдатенков, В.Г. Данильченко, В.И. Корольков // – ФТП. – 2007. – Т.41,№2. – С. 217–220.
106. Шашкин В.И. Решение задачи инжекции носителей тока в изолирующий слой при самосогласованных граничных условиях на контактах / В.И. Шашкин, Н.В. Востоков // ФТП. – 2008. –Т. 42,№11.– С.1339–1344.
107. Пелещак Р.М. Вплив деформаційних дефектів на електричні властивості структури метал – напівпровідник – легований напівпровідник/ Р.М. Пелещак, О.В.Кузик, О.О.Даньків // УФЖ. –2010. – Т.55, №4. – С. 437 – 442.
108. Управление характером токопереноса в барьере Шоттки с помощью δ-легирования: расчет и эксперимент для Al/GaAs / В.И. Шашкин, А.В. Мурель, В.М. Данильцев [та ін.] // ФТП.– 2002.– Т.36,№5.– С.537–542.
109. Бехштедт Ф. Поверхности и границы раздела полупроводников / Ф. Бехштедт, Р. Эндерлайн. – М.: Мир,1990.– 569с.
110. Пожела Ю.К. Большое повышение максимальной дрейфовой скорости электронов в канале полевого гетеротранзистора / Ю.К. Пожела, В.Г. Мокеров // ФТП.– 2006. –Т.40.– С.362–366.

111. Высота барьера и туннельный ток в диодах Шоттки со встроенными слоями квантовых точек / А.И.Якимов, А.В.Двуреченский, А.И. Никифоров [та ін.] // Письма в ЖЭТФ. – 2002. – Т. 75, №2. – С. 113–117.
112. Observation of the negative differential capacitance in Schottky diodes with InAs quantum dots near room temperature /S.D. Lin, V.V. Ilchenko, V.V. Marin [et al.] // Appl. Phys. Lett. –2007. –V.90,№1-3.–P. 263114.
113. Bisability of Resonant Tunnel Diode structure with InAs Quantum Dots /K. Yoh, H. Kazama, Y. Kitashou, T. Nekano // Phys.Stat.Sol.(b). – 1997. –Vol. 204, № 3. – P. 378–381.
114. Coherent tunneling in a semiconductor system: Double barrier resonant-tunneling structure built in the Schottky barrier / D.I. Sheka, O.V. Tretyak, A.M. Korol [et al.] // Journal of physical studies. – 2007.–V.11,№.3. – P.294 – 297.
115. Пархоменко Я.А. Особенности электролюминесценции в гетеро-структурах с квантовыми точками InSb в матрице InAs / Я.А. Пархоменко, Э.В. Иванов, К.Д. Моисеев // ФТП. – 2013.–Т. 47, № 11.– С.1536–1541.
116. Фотопровідність та фотопольова емісія в багатошарових Si/Ge гетероструктурах із квантовими точками / С.В. Кондратенко, О.В. Вакуленко, Ю.М. Козирев [та ін.] // Укр. фіз. журн. –2010. – Т. 55, № 4. – С. 381–388.
117. Леденцов Н.Н. Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры. Обзор / Н.Н. Леденцов, В.М. Устинов, В.А. Щукин, [та ін.] // ФТП. –1998. – Т.32,№4. – С. 385–410.
118. Цацульников А.Ф. Латеральное объединение вертикально связанных квантовых точек / А.Ф. Цацульников, А.Ю. Егоров // ФТП. – 1997. – Т.31,№7.– С.851–854.
119. Моделирование формирования в електрическом поле однородной єпитаксиальной пленки на подложке при рассогласованных параметрах

их решеток / Р.М. Пелещак, Н.В. Дорошенко, Н.Я. Кулык, Н.И. Жук // Современные информационные и электронные технологии: материали XIV Международной научно-практической конференции, 27-31 мая. – Одесса, 2013.– С.166–167.

120. Пелещак Р.М. Вплив електрон-деформаційних ефектів на електронну структуру квантових точок у напружених наногетероструктурах / Р.М. Пелещак, Н.Я. Кулик // УФЖ. – 2014. – Т.59, № 11. – С.1099–1107.
121. Пелещак Р.М. Вплив неоднорідно-деформованої гетеромежі квантова точка –матриця на квантово-розмірні стани зарядів / Р.М. Пелещак, Н.Я. Кулик // Фізика і Хімія твердого тіла . – 2015. – Т.16, № 4. – С.641–648.
122. 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.
123. Влияние неоднородной деформации границы раздела квантовая точка-матрица на квантово-размерные состояния заряда / Н.Я. Кулык, Р.М. Пелещак, М.В. Дорошенко [та ін.] // Современные информационные и электронные технологии: труды XVI Международной научно-практической конференции, 25-29 мая. – Одеса, 2015. – С.250–251.
124. Електронна структура КТ у напружених наногетероструктурах під впливом електрон-деформаційної взаємодії /Н.Я. Кулик, Р.М. Пелещак, О.О. Даньків [та ін.] // Розвиток сучасної освіти і науки: результати, проблеми, перспективи:тези доповідей Міжнародної науково-практичної конференції молодих вчених, 21-22 листопада. –Дрогобич, 2013. – С.294.
125. Исследование структуры рекомбинационного излучения квантовых точек InAs, выращенных на вицинальных поверхностях GaAs / В.Г. Талалаев, Б.В. Новиков [та ін.] // ФТП.– 2000. – Т. 34,№4. – С. 467–475.

126. Fabrication of (In,Ga)As quantum-dot chains on GaAs(100) / Z.M. Wang, K. Holmes, Yu. I. Mazur, G.J. Salamo // Appl. Phys. Let.– 2004.–V.84. – P. 1931.
127. Peleshchak R.M. Electric properties of the interface quantum dot – matrix / R.M. Peleshchak, I.Ya. Bachynsky // Condensed Matter Physics. – 2009.– V. 12,№2.– P. 215–223.
128. Теодосиу К. Упругие модели дефектов в кристаллах / К.Теодосиу. – М.: Мир,1985. – 128 с.
129. Барические свойства квантових точек InAs / Б.В. Новиков, Г.Г. Зегря, Р.М. Пелещак [та ін.] // ФТП. –2008.–Т. 42,№9.– С. 1094–1101.
130. Пелещак Р.М. Частотна модуляція рекомбінаційного випромінювання гетероструктури InAs/GaAs з квантовими точками InAs під впливом акустичної хвилі / Р.М. Пелещак, О.О. Даньків, О.В. Кузик // УФЖ.– 2011.–Т. 56,№4.– С. 346–353.
131. Suzuura H. Phonons and electron-phonon scattering in carbon nanotubes / H. Suzuura, T. Ando // Phys. Review B.– 2002. –V. 65.– P.235412-1–235412-15.
132. Мессия А. Квантовая механика / А. Мессия. – Квантовая механика. – Т.1. –М.: Наука, 1978 .– 480 с.
133. Peleshchak R.M. 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.
134. Математичне моделювання просторово-часового розподілу дефектів у тришарових напружених наногетеросистемах / Р.М. Пелещак, М.В. Дорошенко, Н.Я. Кулик [та ін.] // Актуальні проблеми фізики, математики та інформатики. – Дрогобич . – 2013. – №5. – С.56–61.

135. 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. Пелещак, 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.
136. Панасюк В.В. Механика разрушения и прочность материалов: справ. пособие: в 4 т.– Киев: Наукова думка, 1988. – 436с.
137. Мэтьюз Д.Г. Численные методы. Использование Matlab / Д.Г. Мэтьюз, К.Д. Финк .– М.: Вильямс, 2001. –720с.
138. Бейбалаев В.Д. Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.- мат. науки / В.Д. Бейбалаев. – 2012 .– Т.2,№27. – 183с.
139. Глазунов Ю.Т. Вариационные методы / Ю.Т. Глазунов.– М.:РХД, 2006.
140. Остудін Б.А. Вісник Львів. ун-ту. Сер. прикл. матем. та інформ./ Б.А. Остудін, Ю.М. Сибіль, А.В. Романенко.–2003.–Т. 6.
141. Кутній М.В. Чисельні методи. Навчальний посібник для вищих навчальних закладів / М.В. Кутнів. –Л.: Растр-7, 2010. – 286 с.
142. Пелещак Р.М. Моделювання розподілу потенціалу в бар’єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром квантових точок / Р.М. Пелещак, І.І. Лазурчак, М.В. Дорошенко, Н.Я. Кулик // Фізика і Хімія твердого тіла . – 2014. – Т.15, № 4. – С.693-698.
143. Пелещак Р.М. Керування струмопереносом у діодах Шотткі за допомогою квантових точок / Р.М. Пелещак, Н.Я. Кулик, В.Б. Британ // Сенсорна електроніка та мікросистемні технології.– 2015. – Т.12, № 4. – С.60-69.
144. 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.

145. Антонов Л.И. Методика решения задач по электричеству/ Л.И. Антонов, Л.Г. Деденко, А.Н. Матвеев.–М.: МГУ, 1982.
146. Абрамовиц М. Справ. по спец. функциям с формулами, графиками и математическими таблицами / М.Абрамовиц, И.Стиган.–М.:Наука,1979.–832с.
147. Зи. С. Физика полупроводниковых приборов / С. Зи.–М.:Мир,1984.–Т.1.–388с.
148. Моделирование формирования в електрическом поле однородной єпитаксиальной пленки на подложке при рассогласованных параметрах их решеток / Р.М. Пелещак, Н.В. Дорошенко, Н.Я. Кулык, Н.И. Жук // Современные информационные и электронные технологии: материали XIV Международной научно-практической конференции, 27-31 мая. – Одесса, 2013.– С.166-167.