

ФІЗИКА

УДК 621.315.592

Надточий В.А., Воронова И.В.

¹ доктор физ.-мат. наук, профессор, заведующий кафедрой физики, ГБУЗ «ДГПУ»

e-mail: kafedrafiziki2018@gmail.com, ORCID 0000-0001-9890-171X

² студентка 4 курса физико-математического факультета, ГБУЗ «ДГПУ»

e-mail: iryna.voronova.779@gmail.com, ORCID 0000-0002-4880-752X

НИЗКОРАЗМЕРНЫЕ СТРУКТУРЫ И ИХ СВОЙСТВА

Предметом данной статьи являются структуры ограниченных размеров с величинами порядка нанометров и особыми физическими свойствами, в которых проявляется квантование энергетического спектра подвижных носителей заряда.

Ключові слова: *квантовые точки, квантовые нити, наноструктуры, эпитаксия, низкоразмерные структуры*

Введение

Особую актуальность низкоразмерные системы приобрели в последние годы, когда мощная экспериментальная база, которую получили в свое распоряжение физики-экспериментаторы, открыла реальные возможности для контролируемого получения разного рода низкоразмерных структур, а поэтому и для исследования их уникальных свойств, к которым приводит именно снижение размерности.

Цель статьи — определить критерий, по которому можно осуществлять разграничение низкоразмерных кристаллических систем, свойства которых можно описать исключительно законами квантовой или классической физики, привести примеры типичных квантово-размерных структур, используемых в нанoeлектронике и рассмотреть особенности зависимостей плотности энергетических состояний носителей заряда в объемных полупроводниках и квантово-размерных структурах.

Основная часть

Размеры какого-либо объекта могут быть ограничены в одном, двух или трех направлениях. В зависимости от характера такого ограничения (размерности объекта) получают разными по своей сущности и физическим свойствам наноструктуры.

Если размеры системы ограничены в одном направлении длиной волны де-Бройля свободного электрона, то такую систему называют квантовым

слоем, или 2D структурой. Их реальными аналогами являются поверхности, границы раздела, тонкие эпитаксиальные пленки и др. Если размеры системы ограничены дебройлевской длиной волны в двух направлениях, то такие объекты называют квантовыми нитями (проводами) и обозначают 1D структурами. Ограниченные дебройлевской длиной объекты во всех трех направлениях называют квантовыми точками, или 0D структурами. Их аналоги — нанокластеры в кристалле и разные искусственные ансамбли частиц наноразмеров, а также искусственные системы, сформированные периодической последовательностью квантовых слоев, наращиваемые один на другом в направлении, перпендикулярном к плоскости слоя. Такие системы называются сверхрешетками, гетероструктурами [1].

Почему же ограничения размеров системы могут сопровождаться существенными изменениями их физических свойств? Принципиальный ответ известный: система неограниченных размеров может быть однородной, свойства которой не зависят от координат $X Y Z$ (или радиус-вектора r) во всем диапазоне их возможных значений от $-\infty$ до $+\infty$, а система ограниченных размеров таковой быть не может. В однородной системе импульс P частицы сохраняется, $P = const$, то есть не изменяется без воздействия внешней силы. Под действием внешней силы импульс непрерывно меняется, изменяется и энергия, поскольку $E = \frac{P^2}{2m}$ (m — масса частицы.)

В системе ограниченных размеров импульс частицы приобретает очень важное свойство — он может принимать уже только определенные дискретные значения. Величина дискретности ΔP между двумя последовательными разрешенными его значениями во время движения в направлении ограничения определяется характеристическим размером L системы в этом направлении, а $\Delta P = \frac{h}{L}$, где h — постоянная Планка. Очевидно, что непрерывное изменение импульса частицы возможно только в системе неограниченных размеров, если $L \rightarrow \infty$.

Дискретность импульса частицы приводит к дискретности изменения ее энергии $E = \frac{\Delta P^2}{2m}$, а поэтому к появлению принципиально новых свойств во взаимодействии с внешними полями, которые не свойственны свободной частице в объемном(3D) пространстве.

Будет ли дискретность энергетического спектра системы ограниченных размеров проявляться в ее поведении на практике, зависит от того, каким является соотношение между величиной дискретности, обусловленной ограничением размеров и тепловым размытием энергетических уровней kT , где

k — постоянная Больцмана, T — температура. Если $kT > \Delta E$, то тепловое расширение дискретных уровней размывает их в непрерывную энергетическую полосу и система ограниченных размеров ведет себя так, как и система неограниченная. Если $\Delta E > kT$, то в свойствах системы появляются принципиально новые особенности, обусловленные размерным квантованием энергетического спектра.

Оценим величину дискретности для некоторых размеров системы. Пусть этот размер $L = 1$ мм. Поскольку постоянная Планка $h = 4,1357 \cdot 10^{-15} \text{ эВ} \cdot \text{с}$, то $\Delta P = 4 \cdot 10^{-14} \frac{\text{эВ} \cdot \text{с}}{\text{см}}$. Если это значение ΔP ввести в соотношение для дискретности энергии, то получим величину $\Delta E = 1,5 \cdot 10^{-12}$ эВ. Сравним величину ΔE с тепловой энергией движения частицы kT . При комнатной температуре она составляет приблизительно $2,5 \cdot 10^{-2}$ эВ, что существенно превышает значение дискретности энергии ΔE . Поэтому при комнатных температурах ограничение размеров системы до 1 мм не приведет к появлению принципиально новых свойств с точки зрения ее энергетического спектра. Это означает, что при обычных, «бытовых» размерах систем импульс и энергия свободных частиц в них изменяются квазинепрерывно.

Если сравнить величину дискретности энергии, найденную выше, с тепловой энергией, то увидим, что она соответствует температуре $T = \frac{\Delta E}{K_0} \approx 2 \cdot 10^{-8}$ К. Это значит, что только при температурах порядка 10^{-8} К в этой системе могут появляться принципиально новые явления, обусловленные ограничением их размеров до 1 мм. Приведенные оценки показывают, что при сверхнизких температурах и в достаточно габаритных образцах может наблюдаться квантование энергетического спектра, обусловленное конечностью этих габаритов. Поэтому, чтобы разграничить низкоразмерные системы, свойства которых описываются исключительно законами квантовой механики, от 3D систем, свойства которых довольно хорошо можно описать законами классической физики, удобно воспользоваться параметром, который разделяет эти две группы объектов. Этим параметром является длина волны де-Бройля свободного электрона $\lambda = \frac{h}{P}$. Если размеры системы становятся соизмеримыми с λ свободной квазичастицы или меньшими, для её описания уже в принципе не могут быть применены законы классической физики, а систему следует рассматривать как принципиально квантово-механическую.

Важный вопрос состоит в том, можно ли создать реальные кристаллические структуры, размеры которых были бы меньшими дебройлевской длины

волны λ свободного электрона. Для этого оценим значения длины волны λ свободного электрона в практически важных полупроводниках и сравним это значение с постоянной α кристаллической решетки, которая является количественной характеристикой элементарной ячейки кристалла.

В полупроводниках Ge и Si концентрацию электронов можно изменять в зависимости от температуры в широких пределах [2], поскольку

$$n = N_c \cdot e^{-\frac{E_c - E_f}{kT}},$$

где N_c — эффективная плотность состояний в зоне проводимости, E_f — энергия Ферми, k — постоянная Больцмана. При низких температурах электронный газ становится невырожденным, и энергия электронов уже определяется не энергией Ферми, а их тепловой энергией, поэтому $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mk \cdot T}}$.

Если брать эффективную массу электрона равной $m = 0,1m_0$ и подставить все фундаментальные физические константы, то получим

$$\lambda = \frac{4175}{\sqrt{T}}(\text{Å}) \quad (1)$$

Если подставить, например, $T = 4,2$ К (температуру кипения жидкого гелия), то получим $\lambda(4,2 \text{ К}) \approx 200$ нм, что уже на 2-3 порядка больше типичного значения параметров межатомных расстояний в полупроводниках Ge ($\alpha = 0,566$ нм) и Si ($\alpha = 0,543$ нм). Поэтому в полупроводниковых структурах, размеры которых составляют величины ≤ 50 нм, при сравнительно низких концентрациях свободных носителей заряда четко проявляются квантоворазмерные эффекты. При переходе от 3D структур к структурам низкоразмерным мы тем самым переходим от 3D движения микрочастиц к их движению в структурах более низкой размерности (0D, 1D или 2D типа), каждое из которых имеет свои особенности, не свойственные движению высшей размерности.

Рассмотрим теперь кратко вопрос об электронных свойствах упруго-напряженных островков, образующихся на промежуточном этапе роста расогласованных полупроводниковых систем. На рис. 1 в качестве примера приведено изображение ансамблей островков в системах InAs/GaAs (100), полученное методом просвечивающей электронной микроскопии. В данном случае InAs островки имеют средний латеральный размер примерно 10 нм и поверхностную плотность $7 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$. При таких размерах островков плотность энергетических состояний, которые могут занимать носители заряда внутри островка, существенно отличается от плотности энергетических состо-

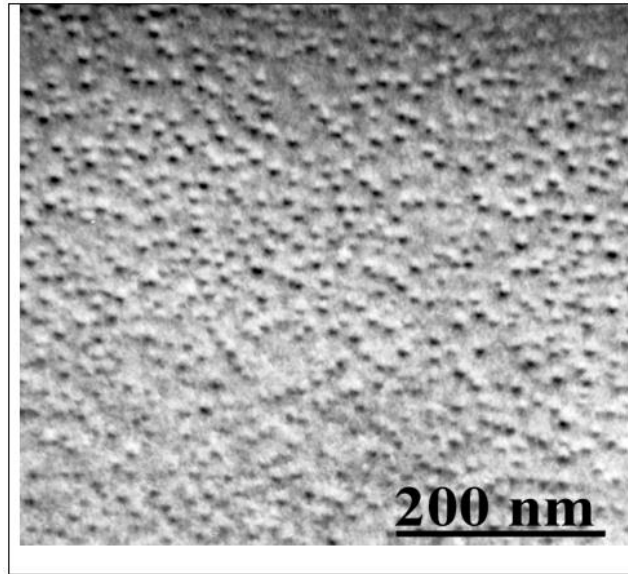


Рис. 1: Изображение поверхности, полученное методом просвечивающей электронной микроскопии после осаждения 2 монослоев InAs на поверхность GaAs (100) при температуре $T = 440$ °C и скорости осаждения InAs $V = 0.05 ML/s$ [3]

яний в объемном полупроводнике. Как известно [2], в объёмном полупроводнике электроны и дырки могут иметь любую энергию из числа разрешенных энергетических состояний, находящихся внутри зоны проводимости и валентной зоны соответственно. Движение носителей заряда в идеальном кристалле имеет тот же характер, что и в свободном пространстве, с заменой реальной массы электронов и дырок их эффективными массами. Это связано с тем, что носители заряда двигаются в периодическом потенциале решетки твердого тела. Для плотности энергетических состояний электронов объемного полупроводника $\rho^{3D}(E)$ вблизи края зоны проводимости 0 справедливо выражение

$$\rho^{3D}(E) = \frac{(2m/\hbar^2)^{3/2}}{2\pi^2} (E - E_0)^{1/2}, \quad (2)$$

где \hbar — постоянная Планка и m — эффективная масса электрона. Как видно из этой формулы, на краю зоны проводимости функция $\rho^{3D}(E)$ равна нулю, поэтому число электронов, которые могут находиться в состояниях с низкой энергией вблизи E_0 , весьма мало. Между тем, именно эти электроны участвуют в оптических переходах с испусканием или поглощением фотона.

Рассмотрим теперь случай двойной гетероструктуры типа квантовой ямы [3], когда тонкий слой полупроводникового материала с меньшей шириной запрещенной зоны E_g заключен между двумя слоями полупроводника с большей шириной запрещенной зоны E_g^B . Для определенности будем говорить о гетероструктуре, когда запрещенная зона узкозонного материала целиком

находится внутри запрещенной зоны широкозонного материала. Тогда широкозонные «обкладки» являются барьерами для движения как электронов, так и дырок узкозонного полупроводника. Уровни энергии электронов находятся из решения стационарного уравнения Шредингера для волновой функции $\Psi(R)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U \right] \Psi = E\Psi \quad (3)$$

с соответствующими условиями на гетерогранице. Нетрудно убедиться, что в идеализированном случае, когда потенциал $U(R)$ есть одномерная квантовая яма длины L с барьерами бесконечной высоты, движение электронов будет квазиклассическим в направлениях вдоль барьеров, а в направлении, перпендикулярном барьеру, возникнут дискретные уровни энергии

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 n^2, \quad (4)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$

Очевидно, что расстояние между двумя низшими уровнями энергии в зоне проводимости составляет заметную величину только при достаточно малых значениях L . В этом и состоит суть квантово-размерного эффекта: для его проявления необходимо, чтобы характерный размер структур (в данном случае — ширина квантовой ямы) был порядка длины волны де-Бройля для электрона в объемном полупроводнике (примерно 20 нм в случае CaAs). Из (4) следует, что минимальная энергия оптических переходов в гетероструктуре типа квантовой ямы равна

$$E_{opt} = E_g + E_{el} + E_{h1} = E_g + \Delta E(L) \quad (5)$$

где E_{el} и E_{h1} — минимальный и максимальный дискретные уровни энергии для электронов и дырок соответственно. Таким образом, квантово-размерный эффект приводит к зависимости длины волны излучения от ширины ямы; из (4) следует, что чем шире яма, тем меньше энергия фотона и больше длина волны. То, что в квантовой яме существуют дискретные уровни энергии, приводит к перераспределению электронных состояний внутри зоны проводимости. Можно показать, что плотность энергетических состояний в случае «двумерной» гетероструктуры имеет вид

$$\rho^{2D}(E) = \sum_n \frac{n}{\pi \hbar^2 L} \Theta(E - E_n) \quad (6)$$

где $\Theta(E - E_n)$ — функция ступени.

Совершенно аналогично, для случая одномерной квантово-размерной структуры типа «квантовой проволоки», в которой движение носителей заряда ограничено по двум направлениям, для собственных значений энергии E_{nm} получим формулу типа (4), но с двумя квантовыми числами n и m . При этом движение носителей квазиклассично в направлении квантовой проволоки и вырождено по двум другим направлениям. Плотность энергетических состояний электронов в квантовой проволоке имеет вид

$$\rho^{1D}(E) = \sum_{nm} \frac{(n^2 + m^2)^{\frac{1}{2}}}{2\pi\hbar L} N_{QW} (E - E_{nm})^{-\frac{1}{2}} \quad (7)$$

где N_{QW} — поверхностная плотность квантовых проволок. Наконец, для трехмерного островка, у которого все линейные размеры составляют величину порядка нескольких десятков нм, движение носителей заряда будет вырождено по всем трем направлениям, откуда и происходит название «квантовая точка». Для собственных значений энергии E_{nml} будем иметь формулу типа (4) с тремя квантовыми числами n , m и l . При этом плотность энергетических состояний электронов в квантовой точке является суммой атомно-подобных дискретных уровней энергии

$$\rho^{0D}(E) = \sum_{nml} 2N_{QD} \delta(E - E_{nml}) \quad (8)$$

где N_{QD} — поверхностная плотность квантовых точек и $\delta(E - E_{nml})$ — дельта-функция Дирака.

Физический смысл формулы (8) очевиден: на каждом дискретном уровне энергии в квантовой точке может находиться два электрона с различными ориентациями спинов, а плотность этих уровней определяется плотностью самих квантовых точек. Изменение плотности состояний при уменьшении размерности структуры иллюстрируется рис. 2. Дискретный атомо-подобный спектр энергий в квантовой точке и его зависимость от размера островка позволяет создавать полупроводниковые лазеры и другие оптоэлектронные устройства с активной областью на основе ансамблей квантовых точек, обладающие следующими преимуществами: 1) возможность изменения длины волны за счет размера островков; 2) высокая температурная стабильность при комнатной температуре за счет дискретизации уровней энергии и 3) низкий пороговый ток за счет перераспределения плотности состояний внутри зоны проводимости и валентной зоны.

Читателям, интересующимися оптическими свойствами и лазерами на их основе мы рекомендуем монографию [4] и статьи [5,6], где эти вопросы освещены достаточно подробно.

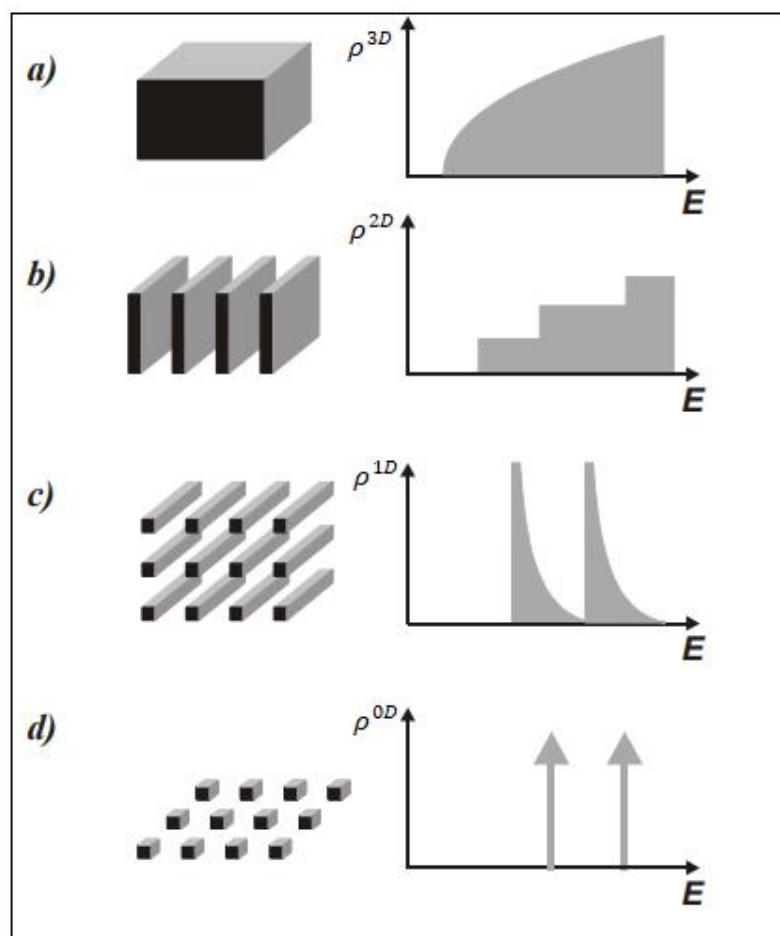


Рис. 2: Качественный вид плотности энергетических состояний носителей заряда в объемном полупроводнике (а), квантовой яме (b), квантовой проволоке (с) и квантовой точке (d)

Выводы

В работе показано, что разграничение кристаллических систем на квантово-размерные и объёмные можно осуществлять по величине длины волны де-Бройля свободного электрона. Рассмотрены электрические свойства низкоразмерных квантовых структур. Уровни энергии электрона определены из решения уравнения Шредингера. В квантовой яме с барьерами бесконечной высоты движение электронов является квазиклассическим вдоль барьеров, а в направлении перпендикулярно к барьеру возникают дискретные уровни энергии для электронов, расстояние между которыми возрастает при малых значениях длины ямы в чем и суть квантово-размерного эффекта. Дискретность уровней приводит к перераспределению электронных состояний внутри зоны проводимости.

Для одномерной квантово-размерной структуры движение квазиклассично в направлении квантовой нити и вырождено по двум другим направлениям. Для трехмерного наноструктура движение носителей заряда вырождено по всем трем направлениям.

Литература

1. Фрейк Д.М., Яцишин Б.П. Технологічні аспекти нанокластерних і нанокристалічних структур. Фізика і хімія твердого тіла. Т. 8, № 1. 2007. С. 7–24.
2. Шалимова К.В. Физика полупроводников. М. : Энергия, 1976. 416 с.
3. Дубровский В.Г. Теоретические основы технологии полупроводниковых наноструктур. Санкт–Петербург : Ун-т ИТМО, 2019. 225 с.
4. Кульбачинский В.А. Двумерные, одномерные, нульмерные структуры и сверхрешетки. Москва : МГУ, 1998. 162 с.
5. Силлин А.П. Полупроводниковые сверхрешетки. УФН. Т. 147. Вып. 3. 1985. С. 485–521.
6. Устинов В.М. Технология получения и возможности управления характеристиками структур с квантовыми точками. ФТП. Т. 38, Вып. 8. 2004. С. 963–970.

Nadtochyi V.A., Voronova I.V.

Donbas State Pedagogical University, Sloviansk, Ukraine.

Low-dimensional structures and their properties

The subject of this article are structures of limited dimensions with values of the order of nanometers and special physical properties, in of which quantization of the energy spectrum of mobile charge carriers.

Keywords: *quantum dots, quantum filaments, nanostructures, epitaxy, low-dimensional structures.*