

Київський університет імені Тараса Шевченка

На правах рукопису

**КОРОЛЬ АНАТОЛІЙ МИКОЛАЙОВИЧ**

УДК 537.311.322

**РЕЗОНАНСНЕ ТУНЕЛЮВАННЯ ЗА УЧАСТЮ ГЛИБОКИХ  
ЦЕНТРІВ В НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СТРУКТУРАХ  
ТА ЗВ'ЯЗАНІ З НИМ ЕФЕКТИ**

01. 04. 10 - Фізика напівпровідників і діелектриків

**АВТОРЕФЕРАТ**

дисертації на здобуття наукового ступеня  
доктора фізико-математичних наук

Київ – 1999

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Українському державному університеті харчових технологій

Офіційні опоненти:

член-кореспондент Академії педагогічних наук України, доктор фізико-математичних наук, професор, перший проректор Київського університету імені Тараса Шевченка  
ТРЕТЯК Олег Васильович

доктор фізико-математичних наук, провідний науковий співробітник Інституту фізики напівпровідників НАН України  
ВАСЬКО Федір Трохимович

доктор фізико-математичних наук, професор, професор кафедри загальної та теоретичної фізики Національного технічного університету України «КПІ»  
СНАРСЬКИЙ Андрій Олександрович

Провідна організація: Інститут фізики НАН України

Захист відбудеться 1999 р. о                      годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д26.001.31.в Київському університеті імені Тараса Шевченка  
за адресою: 252127, м.Київ, пр.акад. Глушкова 6, ауд. 46.

З дисертацією можна ознайомитись в бібліотеці Київського університету імені Тараса Шевченка.

Автореферат розіслано

1999 р.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради, канд.фіз.-мат. наук

Шкавро А.Г.

**Актуальність теми.** В напівпровідниковій мікроелектроніці сьогоdnішнього дня спостерігається значний поступ, який став можливим передусім завдяки успіхам твердотільної технології. Інтенсивно вивчаються такі напівпровідникові об'єкти, які вдалося створити зовсім недавно: різноманітні тунельно-резонансні структури (TPC), квантові хвильоводи різних форм і конфігурацій, низьковимірні квантові структури (квантові дроти, квантові точки), квантові кільця, різні типи надструктур, зокрема, надгратки, невпорядковані системи, квазіперіодичні ланцюги і таке інше. Багато із згаданих об'єктів вже практично використовуються, але все ж таки сучасний період можна охарактеризувати, як період широкого, всебічного вивчення тих структур, що їх можна створити на базі нової технології. В періодиці з'являється також багато робіт, де пропонуються нові напівпровідникові прилади, дія яких ґрунтується на згаданих структурах.

З іншого боку добре відомо, яку велику роль в роботі напівпровідникових можуть відігравати глибокі домішкові центри, які в деяких випадках вводяться в напівпровідники штучно, цілеспрямовано, в інших – існують незалежно. При цьому відомо, що за допомогою тих чи інших технологічних прийомів можливим є досить точне регулювання характеристик вказаних структур, однак роль глибоких центрів у цьому відношенні досліджена ще зовсім недостатньо. Далі, оскільки більшість із зазначених об'єктів є бар'єрними структурами, то цілком зрозуміло є також важливість явища резонансного тунелювання за участю глибоких центрів в сучасних напівпровідникових структурах (тобто, тунелювання за допомогою або через глибокі центри). Водночас технологія введення глибоких центрів з бажаними параметрами в напівпровідникові структури зараз добре відома і перевірена.

Таким чином, проблема вивчення ролі резонансного тунелювання за участю глибоких центрів в фізичних процесах в різноманітних сучасних напівпровідникових структурах, а також аналіз можливості регулювання характеристик вказаних структур за допомогою введення в них глибоких домішкових центрів є вельми актуальними.

**Мета і задачі дослідження.** Із сказаного вище випливає мета роботи: дослідити роль резонансного тунелювання за участю глибоких центрів в електронних процесах в різноманітних конкретних напівпровідникових структурах та з'ясувати можливість за допомогою глибоких центрів цілеспрямовано регулювати характеристики різних напівпровідникових структур. При цьому особлива увага приділена демонстрації того факту, що вплив глибоких домішків та резонансне тунелювання за участю глибоких центрів можуть бути суттєвими в найрізноманітніших напівпровідникових структурах: і новітніх (таких як

квазіперіодичні надгратки Фібоначчі, мезоскопічні кристали), і таких, що вже стали традиційними (наприклад, контакт метал-напівпровідник).

Аналіз літературних даних показав, що існують лише окремі, нечисленні роботи по вивченню резонансного тунелювання за участю глибоких центрів в сучасних напівпровідникових структурах. Недостатньо також приділено уваги впливу глибоких рівнів на характеристики напівпровідникових систем. Результати не мають систематизованого, упорядкованого і цілеспрямованого характеру.

**Наукова новизна** одержаних в даній дисертації результатів полягає у такому.

Вперше одержано і проаналізовано тунельні спектри неупорядкованих напівпровідникових надграток з глибокими центрами в потенціальних бар'єрах. Показано, що спектри таких надграток кардинально відрізняються від спектрів неупорядкованих надграток без розсіювачів. Зокрема, один з дуже важливих результатів полягає у тому, що завдяки глибоким центрам неупорядкована надгратка може стати абсолютно прозорою при певних резонансних енергіях. Коефіцієнт тунельної трансмісії електрона через ґратку  $T$  стає практично рівним одиниці і перевищує значення  $T$  для надгратки без розсіювачів на декілька порядків. Зазначений ефект – делокалізації електронних станів – може спостерігатись в широкому діапазоні значень параметрів задачі. Вперше одержано немонотонну залежність коефіцієнта прозорості від товщини потенціальних бар'єрів. Проаналізовано різні типи неупорядкованих надграток, в тому числі і в зовнішньому однорідному електричному полі.

Таким чином, показано сильний конструктивний вплив глибоких центрів на процеси в неупорядкованих надгратках: доведена можливість делокалізації електронних станів із відповідними наслідками в їх транспортних властивостях.

Вперше запропоновано новий тип такого важливого об'єкту досліджень, як напівпровідникові квазіперіодичні надгратки Фібоначчі і доведена можливість існування надграток такого типу. Квазіперіодична модуляція потенціалу в таких надгратках створюється тільки за рахунок глибоких домішкових центрів, введених в потенціальні бар'єри періодичної ґратки за законом Фібоначчі – іншого фактору квазіперіодичності немає, тобто, доведено, що введення глибоких домішків в періодичну надгратку є самодостатньою причиною для виникнення квазіперіодичної модуляції потенціалу. Детально проаналізовано закономірності енергетичних спектрів запропонованих надграток Фібоначчі.

Вперше одержано і проаналізовано енергетичні спектри деяких інших версій надграток Фібоначчі з домішками в потенціальних бар'єрах.

Вперше запропоновано новий тип квазіперіодичних ієрархічних надграток, квазіперіодична модуляція яких створюється глибокими домішковими центрами.

Проаналізовано характер енергетичних спектрів таких надграток.

Вперше показано, що введення домішкових центрів в мезоскопічний кристал (одновимірну балістичну надгратку) дає змогу в широких межах, цілеспрямовано регулювати енергетичний спектр останнього.

Вперше доведена можливість резонансного тунелювання в L-подібному квантовому дроті (хвильоводі) через бар'єр з домішковими центрами, який запропоновано вводити в кут цієї структури. Проаналізовано транспортні властивості такого хвильоводу і показано, що завдяки домішкам можна досягати суттєвого зменшення втрат в потужності електронної хвилі при проходженні її через хвильовод.

Таким чином, вперше продемонстрована можливість за допомогою домішкових центрів суттєво поліпшувати транспортні властивості і широко регулювати тунельні характеристики таких напівпровідникових наноструктур, як мезоскопічний кристал та L-подібний квантовий хвильовод, тобто таких об'єктів, в яких поєднуються або комбінуються властивості тунельно-резонансних та низьковимірних структур.

Вперше одержано результати аналізу енергетичного спектру дефектної надгратки з розсіювачами в потенціальних бар'єрах (макроскопічний дефект зумовлений тим, що ширина однієї із квантових ям відрізняється від інших).

Вперше розраховано і проаналізовано енергетичні спектри такого важливого напівпровідникового об'єкту, як альтерновані надгратки. Вперше проаналізовано спектри різних типів альтернованих надграток з неоднаковими товщинами бар'єрів. Виявлено важливі особливості спектрів вказаних структур; показано, що розглядані спектри є дуже чутливими до введення глибоких домішків в потенціальні бар'єри альтернованих надграток.

Вперше одержано результати розрахунку імовірності тунельної іонізації глибокого домішкового центра поблизу вільної поверхні напівпровідника за рахунок ізоенергетичних електронних переходів з об'ємних станів в таммівську зону поверхневих станів.

Розраховано імовірність польової іонізації глибокого центра в області просторового заряду, потенціальний рельєф якої описується параболічним законом.

Два останні ефекти можуть відігравати важливу роль в фізичних процесах в бар'єрних структурах.

Показано, що енергетичні спектри таких найбільш вивчених тунельно-резонансних структур, як двобар'єрна ТРС, асиметричні подвійні квантові ями істотно залежать від наявності глибоких домішкових центрів в потенціальних бар'єрах, і отже, за допомогою останніх можна досягати бажаних модифікацій енергетичних спектрів зазначених структур.

Вперше доведена можливість виникнення явища негативного диференціального опору в контакті метал-напівпровідник, в області просторового заряду якого існують глибокі домішкові центри. Одержано вирази для відповідних вольт-амперних характеристик і виявлено найкращі умови для утворення негативного диференціального опору.

Вперше досліджено декілька питань, зв'язаних з проблемою утворення глибоких домішкових станів, а саме: 1) продемонстровано можливість утворення глибоких домішкових станів в двобар'єрній тунельно-резонансній структурі, коли на домішковому потенціалі в області квантової ями зв'язується електронна хвиля, що рухається перпендикулярно до гетеромеж; 2) показано, що врахування самого факту просторової дисперсії діелектричної проникності  $\epsilon$ , а точніше того, що  $\epsilon$  дорівнює одиниці на малих відстанях від домішкового центра, дозволяє вже в простій моделі одержувати як мілкі, так і глибокі рівні в забороненій зоні напівпровідників; 3) на базі методу кр збурень в реалістичній моделі зонної структури напівпровідників вперше одержано прості аналітичні вирази для діелектричної проникності для різних типів безщільових напівпровідників в залежності від параметрів кристала; показано, що внесок в діелектричну проникність вузькозонних напівпровідників (з кейнівською моделлю зонної структури) від спінівідщепленої зони, на відміну від зон легких та важких дірок, є регулярним при малих значеннях мінімальної ширини забороненої зони.

**Практична цінність результатів роботи.** Одержані в дисертації результати дають можливості і конкретні рекомендації для значного поліпшення транспортних властивостей ряду сучасних напівпровідникових структур, таких як невпорядковані надгратки, L-подібний квантовий хвильовод, для використання в значно ширшому діапазоні значень параметрів таких об'єктів, як двобар'єрна тунельно-резонансна структура, асиметричні подвійні квантові ями, мезоскопічний кристал, надгратки з макроскопічними дефектами, альтерновані надгратки, як складових частин сучасної мікро, нано та оптоелектроніки.

Запропоновані в дисертації нові версії таких важливих і перспективних напівпровідникових об'єктів, як квазіперіодичні надгратки Фібоначчі та ієрархічні надгратки, надають нових можливостей для теоретичного, експериментального дослідження та застосування зазначених структур.

Результати роботи дають підстави для ширшого використання такої часто вживаної структури, як діод Шоткі.

Результати роботи створюють також базу для більш гнучкого використання і розширення функціональних можливостей зазначених вище структур та нові можливості для маневру при створенні напівпровідникових приладів з новими властивостями.

**Особистий внесок здобувача.** У всіх роботах із співавторами я брав паритетну участь у постановці відповідних проблем, їх розв'язанні та аналізі одержаних результатів. Крім іншого, авторові належить одержання висновків, аналіз результатів на підставі таких отриманих ним формул – у роботах (номер наводиться із наведеного нижче списку опублікованих мною праць):

2. рівняння (3а) – (3с), (8), (10) і дві останні формули на сторінці 417.
3. рівняння (6), (7), (10), (13), (18), (22), (25), а також результати таблиці для кристалів GaAs, InSb.
4. співвідношення (3), (4), (5), (8), а також результати розрахунку величини  $\epsilon$ , зображені на рисунку 1 для GaAs, InSb.
6. рівняння (2), (3), (7), (8), (10).
7. формули (2), (4) і останнє співвідношення на сторінці 1184.
9. формули (7), (8), (10), (13), (17).
10. рівняння (1), (5), (7), (9), (11), (12).

**Апробація результатів роботи.** Результати роботи було апробовано в таких нарадах, конференціях і т.і.

Восьмое всесоюзное совещание по теории полупроводников, Киев, 1975 год.

Девятое всесоюзное совещание по теории полупроводников, Тбилиси, 1978 год.

Перша республіканська конференція з фізики неупорядкованих систем, Львів, 1993 рік.

16-th Pecar International Conference on Theory of Semiconductors, Odessa, Ukraine, 1994 (дві роботи).

International School-Conference on Physical Problems in Material Science of Semiconductors, Chernivtsi, 1995 (дві роботи).

International Conference Nanomeeting-95, Minsk, 1995.

Международная конференция по физике и технологии тонких пленок МКФТП-V, Ивано-Франковск, 1995 год (дві роботи).

**Публікації.** Результати роботи опубліковано в 24 статтях, 5 тезах конференцій.

**Структура та обсяг роботи.** Дисертація складається із вступної частини, семи розділів (перший з яких є оглядом літератури, інші – оригінальні), загальних висновків та списку використаних джерел із 216 найменувань. Роботу викладено на 285 сторінках, вона містить 49 рисунків, дві таблиці.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

Перший розділ дисертації є оглядом літературних даних з питань, близьких до теми дисертації. В ньому аналізується стан задач, щільно зв'язаних з проблемати, розглянутими в оригінальних розділах, обґрунтовується актуальність досліджень. Аналіз дано в хронологічному порядку, тобто в розвитку, до уваги беруться як теоретичні, так і експериментальні роботи. Особливістю огляду літератури є те, що в ньому заторкуються не лише об'єкти, які зустрічаються в оригінальних розділах, але і інші сучасні напівпровідникові структури, в яких вплив глибоких центрів на їх характеристики також може бути суттєвим.

В другому розділі розглядаються напівпровідникові структури з невеликою кількістю гетеромеж. Мабуть, найбільш вивченою і поширеною серед них є двобар'ерна тунельно-резонансна структура (ДБТРС). Практична дія цієї структури ґрунтується на її енергетичному спектрі, отже, аналіз спектра ДБТРС є важливою задачею. В другому розділі розраховується енергетичний спектр і проводиться його аналіз для ДБТРС, в потенціальних бар'єрах якої містяться глибокі домішки; показується, що вплив розсіювачів на спектр є дуже суттєвим. Розрахунок проводиться методом функцій Гріна, оскільки він, на наш погляд, дає можливість для ширших аналітичних висновків, ніж альтернативні методи.

Розглянемо одновимірну ДБТРС з висотою бар'єрів  $V$ , їх товщиною  $d$ , ширина квантової ями дорівнює  $w$ . Структура є симетричною, тобто висота бар'єрів однакова, ширина теж; бар'єри до того ж вважаються прямокутними. В бар'єри введені так звані "домішкові площини глибоких рівнів" (ДПР); хвильові функції відповідних глибоких станів є сильно затухаючими лише в напрямку, перпендикулярному до гетеромеж [ 1 ]. Нехай на дану структуру падає електронна хвиля з енергією  $E$ , ефективна маса електронів в ямах і бар'єрах в загальному випадку відрізняється, але при проведенні обчислень для деяких гетероструктур, а також, коли це несуттєво, вважатимемо її однаковою ( $m$ ). Нехай в лівому чи правому бар'єрі знаходиться одна ДПР; домішковий потенціал моделюється (як і в [ 1 ])  $\delta$ -функцією з потужністю  $\beta$   $U(x) = \beta \delta(x - x_j)$ , де  $x_j$  – координата домішкового центра. Проаналізувати енергетичний спектр розглядуваної системи зручно, знаючи функцію Гріна задачі  $G(x, x'; E)$ . Цю функцію можна виразити через функцію Гріна  $G^0$  незбуреної домішками системи, розв'язавши відповідне рівняння Дайсона

$$G(x, x'; E) = G^0(x, x'; E) + \frac{\beta G^0(x, x'; E) G^0(x_j, x'; E)}{1 - \beta G^0(x_j, x_j; E)}, \quad (1)$$

а для вирахування функції  $G^0$  скористаємось її спектральним зображенням, знайшовши необхідні хвильові функції як розв'язок відповідного рівняння Шредінґера.

На малюнку 1 зроблено графічний аналіз одержаної ситуації. На ньому схематично зображено хід дійсної частини  $\text{Re } G^{\circ}$  як функції енергії  $E$ , так що перетин горизонтальної прямої  $\beta^{-1}$  з цією кривою (на ділянках, що мають від'ємний нахил) дає шукані значення власних енергій  $E$ . Як бачимо, наявність домішкових центрів призводить до суттєвої зміни енергетичного спектра, тобто до істотної зміни положень резонансних рівнів. Положення цих нових рівнів може регулюватися як природою, так і геометричним розташуванням домішкових центрів.

На підставі аналізу зображених на рисунку 1 кривих можна зробити низку загальних висновків про енергетичний спектр ДБТРС із домішками в бар'єрах. Загальний аналіз ілюструється в роботі чисельними розрахунками для типової ДБТРС GaAs-GaAlAs з конкретними параметрами. Ці розрахунки підтверджують проведений аналіз. Зауважимо, що енергетичний спектр ДБТРС з розсіювачами значною мірою детермінується взаємодією домішкових станів в бар'єрах ("бар'єрних") із електронними станами квантової ями ("ямними"). Обчислення показують, що для того, щоб ця взаємодія була сильною (і отже, був сильним вплив на спектр) необхідне виконання двох умов: 1) енергетичні рівні бар'єрних та ямних станів повинні бути близькими; 2) домішки повинні бути геометрично близькими до квантової ями.

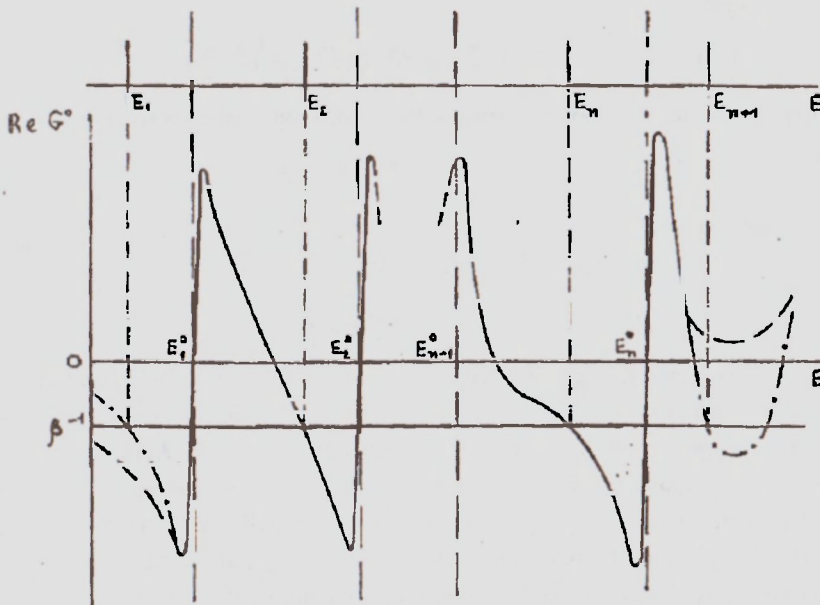


Рис.1. Залежність функції  $\text{Re } G^{\circ}$  від енергії  $E$

Наступною бар'єрною напівпровідниковою структурою, яка розглядається в розділі 2, є асиметричні подвійні квантові ями (АПКЯ), або асиметричні двобар'єрні тунельно-резонансні структури (АДТРС). Можливих варіантів взаємодії домішкових і ямних станів в АПКЯ в залежності від взаємного розташування енергетичних рівнів існує багато і, природно, що, як показує аналіз, енергетичні спектри АПКЯ є значно багатшими ніж спектри двобар'єрної ТРС. В розділі 2 розглянуто випадки введення домішків лише в середній бар'єр та в кожний із трьох наявних бар'єрів. Проаналізовано, зокрема, залежність спектрів від сили домішкового потенціалу

Останнім об'єктом, який вивчається в другому розділі, є структура з однією гетеромежею, а саме, розглядається напівнескінченний напівпровідник, відокремлений площиною  $z=0$  від вакууму. Припускається існування в об'ємі напівпровідника глибоких домішкових станів, а на поверхні розділу – таммівських електронних станів. Аналізується процес релаксації глибокого стану при ізоенергетичних переходах: глибокі рівні – поверхневі стани. Для того, щоб розрахувати імовірність іонізації в зону таммівських станів глибокого (сильно локалізованого) центра, використовується рівняння Дайсона для функції Гріна системи: напівобмежений напівпровідник – глибокий центр, що розташований на відстані  $\Delta$  від поверхні

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = G_{v,T}(\vec{r}, \vec{r}') + \int d\vec{r}'' G_{v,T}(\vec{r}, \vec{r}'') u(\vec{r}'' - \Delta) G(\vec{r}'', \vec{r}'). \quad (2)$$

Тут  $u(r)$  – потенціал глибокого центра, для якого використано модель Слетера-Костера

$$\langle n, \vec{k} | u | n', \vec{k}' \rangle = (2V)^{-3} U_0 \Omega \delta_{nn'} ,$$

де  $|n, \vec{k}\rangle$  – зонні функції в напівпровіднику,  $\Omega$  – об'єм елементарної комірки. Функція Гріна для напівнескінченного напівпровідника записується у вигляді

$$G_{v,T}(\vec{r}, \vec{r}') = G_v(\vec{r}, \vec{r}') + G_T(\vec{r}, \vec{r}'), \quad (3)$$

де  $G_v$  представляє функцію Гріна необмеженого напівпровідника, а  $G_T$  – функція, зв'язана із поверхневими станами. Власні функції, потрібні для обчислення функцій Гріна, розраховувались в [ 2 ]. Ці функції разом із функціями, що відповідають дозволеним зонам, утворюють повну ортонормовану систему, і рівняння ( 2 ) зручно написати в представленні цих функцій. Далі розглядаються розв'язки (для поверхневих станів), що відносяться до забороненої зони кубічного напівпровідника типу  $A_3 B_5$ , котра відокремлює зону провідності і валентні зони. Тоді власні функції для таммівських станів записуються в спрощеному вигляді [ 2 ], а розв'язок рівняння ( 2 ) можна представити у вигляді

$$\langle\langle c\lambda | G | c\lambda \rangle\rangle = \langle\langle c\lambda | G_{\text{от}} | c\lambda \rangle\rangle + \frac{U_0 \Omega}{(2\bar{w})^3} \times \frac{|\langle\langle c\lambda | G_{\text{от}} | c\lambda \rangle\rangle|^2}{1 - U_0 \Omega (2\bar{w})^{-3} \left\{ \sum_{\kappa} [E - \xi_{\kappa}(\kappa) + i\alpha]^{-1} + \sum_{\alpha} 2q_0(\alpha) e^{-2q_0 \Delta} [E - \xi_T(\alpha) + i\alpha]^{-1} \right\}}. \quad (4)$$

Тут  $\alpha$  - двовимірний зведений квазіімпульс,  $E_{\kappa}(\kappa)$  та  $E_T(\alpha)$  - об'ємний та поверхневий закони дисперсії відповідно. Одержана функція має полюси, що відповідають об'ємним та поверхневим станам напівпровідника без домішки, а також полюс, зв'язаний з існуванням домішкового центра. Тоді для імовірності іонізації домішкового центра, пов'язаної із взаємодією глибокого стану з таммівською зоною, виводиться такий вираз

$$\Gamma = \frac{3\pi^2}{\sqrt{2}} w^{-3/2} \kappa_s^{-3} \left( \exp \frac{2(E_{\Delta} + E_g)\Delta}{[2(w + E_g) + k^2(E_{\Delta})]^{1/2}} \right)^{-1} \left[ [(E_{\Delta} + E_g)(E_{\Delta} + E_g - \frac{p^2}{a})] \right], \quad (5)$$

де  $\kappa_s$  - радіус сфери, рівною за об'ємом першій зоні Брилюена,  $w$  - робота виходу,  $E_{\Delta}$  - потенціал іонізації домішкового центра в глибині напівпровідника,  $p$  та  $a$  - "кейнівські" параметри зонної структури.

Розрахунок величини  $\Gamma$  за формулою (5) проведено для напівпровідника GaAs з конкретним - кейнівським - законом дисперсії. Якщо покласти величину потенціала іонізації рівною 0.5 eV, то остаточний вираз для характерного часу, зв'язаного з делокалізацією глибокого стану поблизу поверхні напівпровідника, набуває вигляду

$$T = 3,18 \cdot 10^{-15} e^{0,26 \Delta}, \quad (6)$$

тут  $\Delta$  вимірюється в ангстремах. Із останньої формули випливає, що описаний механізм ізоенергетичного переходу електронів із глибокого центра в зону поверхневих станів може визначати характерний час життя електрона на домішковому рівні поблизу поверхні напівпровідника. Нехай, наприклад, в напівпровіднику з концентрацією легуючої домішки  $N$  об'ємний час життя визначається ізоенергетичним тунелюванням. Розрахунок показує, що характерний час життя  $T$  в рівнянні (6), зв'язаний з описаним вище механізмом, є меншим від об'ємного при  $\Delta \leq 50 \text{ \AA}$  для  $N=10^{24} \text{ м}^{-3}$  і  $\Delta \leq 100 \text{ \AA}$  для  $N=10^{23} \text{ м}^{-3}$ . Таким чином, тут продемонстровано важливу роль, яку можуть відігравати тунельні переходи: домішковий центр - таммівські стани поблизу поверхні напівпровідника.

Останнім часом значна увага приділялась вивченню властивостей різноманітних неупорядкованих об'єктів, в тому числі неупорядкованих напівпровідникових систем. В третьому розділі дисертації розглядаються деякі типи неупорядкованих напівпровідникових надграток. Розраховуються і аналізуються тунельні спектри надграток, в потенціальних бар'єрах яких можуть існувати глибокі домішкові центри - спектри таких НГ, як показано, кардинально

відрізняються від спектрів неупорядкованих ґраток без домішок.

В першу чергу розглядаються надґратки, неупорядкованість яких обумовлена тим, що ширини квантових ям набувають випадкових значень вздовж ланцюга ґратки в кожній даній її реалізації. Надґратка складена із скінченної послідовності одновимірних прямокутних потенціальних бар'єрів однакової висоти  $V$ . Нехай в кожному бар'єрі знаходиться одна "домішкова площина глибоких рівнів" (ДПР) [1], яка знаходиться точно посередині бар'єра; потенціал розсіюючих центрів моделюється  $\delta$ -функцією з потужністю  $\beta$ . Електронні стани всередині бар'єрів описуються рівнянням (атомні одиниці)

$$\text{де } \varepsilon^2 = 2m_d(V-E), \quad \left( \frac{d^2}{dx^2} - \varepsilon^2 \right) \psi(x) = \beta \delta(x-x_j) \psi(x), \quad (7)$$

Розв'язок рівняння (7), а також рівняння для станів в квантових ямах дається у вигляді

$$\psi(x) = A e^{i\kappa x} + B e^{-i\kappa x}, \quad (8)$$

причому в бар'єрах  $\kappa = -i\varepsilon$ , а в ямах  $\kappa = \kappa_w$ ;

$m_d, m_w$  – ефективні маси електронів в бар'єрах та ямах відповідно. Розв'язок системи рівнянь для коефіцієнтів хвильових функцій шукається за допомогою методу трансферних матриць; матриці, що переносять розв'язок через межі розділу бар'єр-яма, є

$$R_n = (2\kappa_n)^{-1} \begin{pmatrix} (\kappa_n + \kappa_{n+1}) e^{i(-\kappa_n + \kappa_{n+1})x_n} & (\kappa_n - \kappa_{n+1}) e^{i(-\kappa_n - \kappa_{n+1})x_n} \\ (\kappa_n - \kappa_{n+1}) e^{i(\kappa_n + \kappa_{n+1})x_n} & (\kappa_n + \kappa_{n+1}) e^{i(\kappa_n - \kappa_{n+1})x_n} \end{pmatrix}, \quad (9)$$

індекс  $n$  відносить розв'язок до певної ями (бар'єра), для парних  $n$  маємо  $\kappa_n = -i\varepsilon$ , для непарних –  $\kappa_n = \kappa_w$ ; матриця, що переносить розв'язок через ДПР, має вигляд

$$M_j = (2\varepsilon)^{-1} \begin{pmatrix} 2\varepsilon - \beta & \beta e^{-2\varepsilon x_j} \\ \beta e^{2\varepsilon x_j} & 2\varepsilon + \beta \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Коефіцієнт трансмісії електрона крізь надґратку дорівнює

$$T(E) = \left| \left( \prod_{n=1}^r R_n' \right)_{11} \right|^{-2}, \quad (11)$$

де  $r$  – кількість меж розділу бар'єр-яма, для парних  $n$  маємо  $R_n = R_{2s}$ , для непарних –  $R_n = R_{2s-1} M_s$ ,  $s = 1, 2, 3, \dots$

Обчислення коефіцієнта трансмісії  $T$  за формулою (11) проведено для надґраток на основі гетероструктури Si-SiC (для якої  $V=0.4eV$ , ефективна маса в

бар'єрах і ямах  $m=0.2m_0$ ) і представлені на рисунку 2. По осі ординат відкладено  $\log T$  в рівномірному масштабі, по осі абсцис – енергія  $E$  в атомних одиницях (максимальні та мінімальні значення  $\log T$  дані в правій частині рисунків). Верхній кривий відповідає випадок відсутності домішок в НГ (ширина бар'єрів  $d=60$  ат.од., кількість періодів ґратки  $l=20$ ), для другої кривої значення параметрів такі:  $l=20$ ,  $d=60$  ат.од.,  $\beta=-0.1$  ат.од., для третьої кривої:  $l=100$ ,  $d=60$  ат.од.,  $\beta=-0.1$  ат.од., для четвертої –  $l=20$ ,  $d=150$  ат.од.,  $\beta=-0.1$  ат.од..

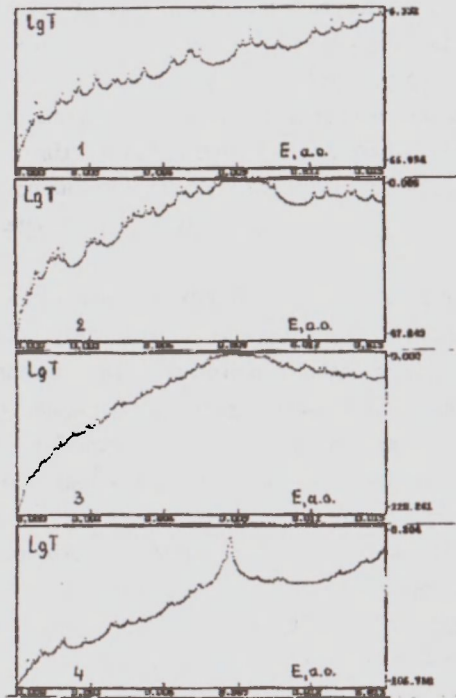


Рис.2. Тунельні спектри неупорядкованої надґратки з різними значеннями параметрів задачі

Аналізуючи результати обчислень, як тих, що представлені на типових рисунках 2, так і багатьох інших, можна дійти таких висновків. Внесення домішків в бар'єри надґратки призводить до надзвичайно суттєвих змін спектра тунельної прозорості. Найважливішою з них є те, що утворюється інтервал енергій, якому відповідають значення коефіцієнта трансмісії  $T$ , близькі до одиниці, тобто в якому ґратка стає практично абсолютно прозорою, або, іншими словами, спостерігається

ефект делокалізації електронних станів. Максимальна величина  $T$  при цьому збільшується на декілька порядків у порівнянні із невпорядкованою НГ без розсіювачів. Значне зростання прозорості стосується не лише резонансної енергії та її околу, а відбувається в усьому інтервалі енергій  $[0, V]$ . Положення резонансної енергії та величина коефіцієнта трансмісії суттєво залежить від параметрів НГ та домішкових центрів. Зокрема, зазначимо, що існує інтервал значень потужності домішкового потенціалу, в якому коефіцієнт  $T$  близький до одиниці; значне збільшення  $\beta$  веде вже до зниження прозорості у порівнянні із ґраткою без розсіювачів.

Також у розділі 3 звернуто увагу на одну досить цікаву обставину, а саме на немонотонну залежність коефіцієнта трансмісії від товщини бар'єрів. Із збільшенням товщин бар'єрів величина  $T$  після певного зменшення починає зростати, досягаючи максимального значення, а потім різко спадає. Отже, це значить, що, якщо розсіяння електронних хвиль відбувається не тільки на гетеромежах, а існує й додаткове розсіяння на домішкових центрах, то найкращі умови для проходження хвилі створюються при певній товщині бар'єрів (не кажучи про зовсім тонкі бар'єри).

Вище вважалось, що параметри глибоких центрів набували однакових значень в кожному із бар'єрів НГ. Природними, однак, є ситуації, коли значення цих параметрів в різних бар'єрах можуть бути різними – тому важливо розглянути такі НГ, невпорядкованість яких породжена параметрами глибоких центрів. Тунельна прозорість таких ґраток також розраховується в дисертації, і відповідні результати представлені в розділі 3. Обчислення проводились за умови, що розкид значень параметрів домішкових центрів підпорядковується гаусовому закону. Результати показують, що в НГ з флюктуючими параметрами домішків також існує широкий діапазон значень параметрів задачі, в якому коефіцієнт трансмісії є близьким до одиниці. Водночас залежність  $T$  від величини дисперсії параметрів глибоких центрів є досить сильною, причому вона посилюється із збільшенням числа періодів НГ.

Іншим типом невпорядкованих НГ, які розглядаються в розділі 3, є ґратки із флюктуючими значеннями товщин бар'єрів: розраховуються тунельні спектри НГ з розсіювачами, в яких невпорядкованість зумовлена тим, що товщини бар'єрів набувають вздовж ланцюга НГ таких значень, які підпорядковуються гаусовому розподілу. В таких ґратках, як показано, теж спостерігається ефект делокалізації електронних станів під впливом розсіювачів; при цьому наявна сильна залежність коефіцієнта прозорості від дисперсії гаусового розподілу.



В кінці розділу 3 коротко аналізуються тунельні спектри невпорядкованих та періодичних НГ із домішками в зовнішньому однорідному електричному полі. Для

розрахунків використана сходинкова апроксимація, яка є зручною і часто зустрічається в літературі.

При невеликих значеннях поля зонний характер періодичної ґратки з глибокими центрами зберігається. Зростання напруженості поля супроводжується появою штарківських сходинок, причому розташування окремих рівнів, відстань між ними суттєво залежить від параметрів глибоких центрів. Для неупорядкованої НГ зовнішнє електричне поле не змінює характеру впливу домішок на тунельні спектри: залежності, проаналізовані вище, залишаються, в основному, в силі.

Четвертий розділ дисертації присвячений розрахунку і аналізу енергетичних спектрів квазіперіодичних напівпровідникових надґраток. Квазіперіодичні системи, як відомо, характеризуються незвичайними фізичними властивостями; їх розуміння потрібне для пояснення низки фізичних процесів, вивчення цих систем обіцяє також бути корисним в застосовному плані.

Центральне місце в розділі займає дослідження напівпровідникових надґраток Фібоначчі; розглядаються також ієрархічні структури. В дисертації пропонуються нові типи НГ Фібоначчі, а саме такі, в яких квазіперіодична модуляція потенціалу створюється за рахунок глибоких центрів, введених в періодичну ґратку за законом Фібоначчі. Енергетичні спектри запропонованих квазіперіодичних надґраток обчислюються і аналізуються за допомогою методу трансферних матриць. Інтервали енергій, для яких значення коефіцієнта трансмісії електрона крізь ґратку близькі до одиниці, утворюють зонну структуру розглядуваних НГ.

Спочатку розглядаються надґратка, створена послідовністю прямокутних потенціальних бар'єрів висотою  $V$ , шириною  $d$ ; ґратка будується з елементів  $A$ :  та  $B$ :  які відрізняються тим, що в потенціальних бар'єрах елементів  $B$  знаходяться глибокі домішки, точніше, як і раніше, домішкові площини глибоких рівнів, – в той час, як в елементах  $A$  домішок немає. Надґратка конструюється згідно з інфляційним правилом Фібоначчі:  $A \rightarrow AB$ ,  $B \rightarrow A$ . Наступні секвенції (генерації) Фібоначчі співвідносяться як

$$S_k = S_{k-1} S_{k-2}$$

де  $k$  – номер секвенції,  $S_1 = \{A\}$ ,  $S_2 = \{AB\}$ . Потенціал розсіюючих центрів моделюється, як і раніше,  $\delta$ -функцією з потужністю  $\beta$ .

Представлені в даному тексті розрахунки проведені для однієї з найбільш популярних та часто використовуваних надґраток на основі гетероструктури  $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$  з параметрами  $x = 0.3$ ,  $V = 0.271$  eV,  $m = 0.096m_0$ ,  $m = 0.067m_0$ ,  $d = 30$  Å,  $w = 40$  Å. На рисунку 3 зображені енергетичні діаграми для шести початкових генерацій Фібоначчі, лінії та точки дають значення дозволених енергій. Рисунку 3.1 відповідає значення  $\beta = -0.05$  ат.од., рисункам 3.2, 3.3 -  $\beta = -0.07$  ат.од., для рисунків 3.1, 3.2 домішкові площини розміщені посередині бар'єрів, а для ри-

сунка 3.3 значення відстані від домішкових центрів до найближчих лівих гетеро-меж  $x_c = 0.35d$ .

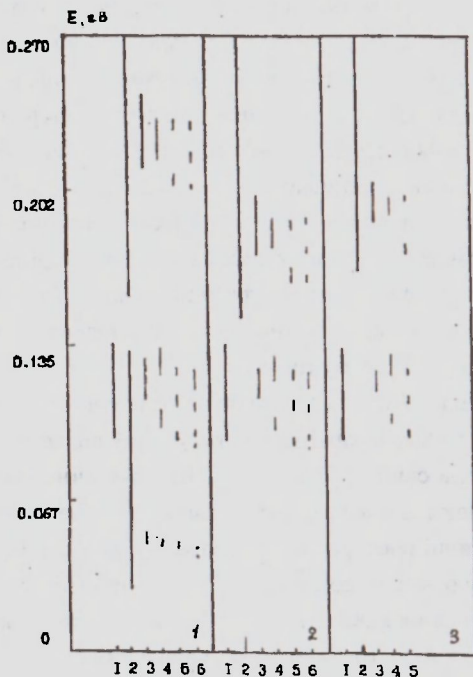


Рис.3. Енергетичні спектри НГ Фібоначчі, початкової секвенції

Аналізуючи одержані результати, треба зауважити таке. Відомо, що розсіювачі, розміщені в кожному потенціальному бар'єрі строго періодичної надгратки, чинять сильний вплив на її енергетичну структуру [ 1 ], що пояснюється сильною взаємодією домішкових станів із резонансами квантових ям та між собою. В НГ, які розглядаються в даному розділі, глибокі домішки виконують ще одну важливу функцію, а саме утворюють квазіперіодичну модуляцію потенціала структури. В результаті спостерігаються енергетичні спектри, характер залежності яких від параметрів задачі є доволі складним. Кількість мінізон, їх ширина та розташування суттєво залежать від потужності розсіювачів, а також від їх положення всередині бар'єрів.

Підсумовуючи особливості енергетичних спектрів досліджуваних надграток Фібоначчі, зупинимось на деяких основних моментах.

1. Введення глибоких домішок в потенціальні бар'єри НГ приводить до утворення та реалізації квазіперіодичної модуляції потенціала. Це проявляється, зокре-

ма, в розщепленні дозволених енергетичних мінізон, починаючи з третьої, за правилами надграток Фібоначчі. Підкреслимо, що ніякого додаткового фактору квазіперіодичності в розглядуваних НГ не існує, і отже, наявність глибоких домішок є самодостатньою причиною для створення квазіперіодичної модуляції Фібоначчі в даних структурах.

2. Кількість дозволених мінізон в кожній генерації Фібоначчі (починаючи з третьої) підпорядковується правилу:

$$Z_N = n F_N + 1,$$

де  $n$  – кількість зон в першій секвенції,  $F_N = F_{N-2} + F_{N-1}$  – число Фібоначчі, що відповідає  $N$ -ій секвенції,  $F_1 = F_2 = 1$ . Написане співвідношення відбиває той факт, що за рахунок домішкових центрів утворюється одна додаткова мінізона дозволених енергій (що справедливо для певного діапазону значень  $\beta$ ).

3. У відповідності з відомими закономірностями спектрів Фібоначчі спостерігається розширення заборонених (і звуження дозволених) мінізон в кожній наступній генерації (за винятком початкових).

4. Спектри мають яскраво виражений тріадний характер, тобто вони складаються з трьох груп зон, таких, що відстань між окремими групами є значно більшою від відстаней між зонами всередині даної групи.

5. Ширини дозволених мінізон залежать від потужності розсіювачів  $\beta$ , причому спостерігається розширення зон із зростанням  $\beta$  при малих значеннях  $\beta$ , і звуження зон при великих  $\beta$ .

В тексті дисертації наводяться ще деякі інші закономірності спектрів запропонованих НГ Фібоначчі. Далі в розділі 4 розраховується інваріант ґраток, що вивчаються, і аналізуються його особливості.

Вище розглядалися НГ Фібоначчі, в яких модуляція потенціалу створювалась лише завдяки домішкам – без залучення додаткових квазіперіодичних факторів. Далі в четвертому розділі досліджуються НГ Фібоначчі, в яких квазіперіодична модуляція створюється за рахунок відомого прийому – варіації товщин потенціальних бар'єрів, – але вважається, що в кожний бар'єр введені глибокі домішки, і аналізуються, як розсіювачі впливають на спектри такої ґратки. Нарешті, вивчається така НГ Фібоначчі, в якій домішки вводяться лише в ті елементи (з котрих будується ґратка), які мають ширші бар'єри, – таким чином в цьому варіанті НГ Фібоначчі реалізується подвійна квазіперіодична модуляція потенціалу. Показано, що одержані спектри вказаних версій НГ демонструють риси, властиві квазіперіодичному потенціалу Фібоначчі, в обох випадках. При цьому внесення домішок істотно модифікує зонну структуру розглядуваних НГ. Закономірності енергетичних спектрів цих ґраток наводяться в розділі 4 дисертації.

У зв'язку із дослідженням спектрів квазіперіодичних НГ в літературі зверталась увага на одну важливу обставину. Ще в перших роботах, присвячених можливості експериментального створення і вивчення цих структур, відзначалось, що їх спектри є чутливими до визначальних параметрів елементів А, В, з яких будується ґратка. В розділі 4 проведено спеціальний розрахунок, який показує, що запропоновані в даній роботі НГ мають в цьому відношенні перевагу над іншими.

В підрозділі 4.3 наводяться результати розрахунку спектрів одного з варіантів ієрархічних надґраток. Пропонується розглянути ґратку, яка побудована з елементів А і В, що означені вище; аналізується один з простих варіантів ієрархічної модуляції, при якому порядковий номер бар'єра з розсіювачами (що відповідає елементу В) в ланцюгу НГ дорівнює 2 для кожного рівня ієрархічності  $s=1, 2, 3, \dots$

Наприкінці 4-го розділу представлено результати обчислень енергетичних спектрів ієрархічних надґраток в зовнішньому однорідному електричному полі. Метою цих розрахунків було продемонструвати принципову можливість, з одного боку, існування, а з другого – аналізу ієрархічних спектрів та спектрів Фібоначчі в залежності від параметрів задачі в зовнішньому електричному полі.

В розділі 5 розглядається ряд різних напівпровідникових структур – об'єднуючим їх є та обставина, що в потенціальних бар'єрах цих структур знаходяться глибокі домішкові центри, вплив останніх на тунельні спектри досліджуваних ТРС і вивчається в даному розділі.

В підрозділі 5.1 аналізується новий клас напівпровідникових наноструктур – мезоскопічних кристалів, що являють собою одновимірну надґратку, рух електронів в якій відбувається в балістичному режимі [ 3 ]. Унікальне поєднання властивостей надґраток з високим рівнем квантової когерентності та низькою розмірністю робить мезокристали важливим та перспективним об'єктом досліджень. Варто також зауважити, що мезокристали по суті поєднують в собі ТРС та квантові хвильоводи, які раніше вивчалися практично незалежно одні від інших.

Як звичайно, квантовий дріт розглядається як двовимірний хвильовод. В рамках методу ефективної маси хвильова функція задовольняє двовимірному рівнянню Шредінґера. Через те, що модулюючий потенціал залежить лише від поперечної координати  $x$ , її можна відокремити від поперечної  $y$  і представити хвильову функцію у вигляді

$$\Psi_n(x, y) = \varphi(x) \sin\left(\frac{n\pi y}{b}\right), \quad (12)$$

де  $b$  – ширина каналу. Припустимо, що потенціальні бар'єри в  $x$  напрямку є прямокутними, а також, що в кожному бар'єрі є одна площина домішкових рівнів. Тоді рівняння для хвильової функції в бар'єрних областях записується так

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \epsilon\psi = [V(x) + \beta \delta(x-x_c)]\psi, \quad (13)$$

де  $\epsilon = \frac{2m\hbar^2}{\hbar^2} E - \left(\frac{n\pi}{b}\right)^2$ ,  $V(x) = 2m\hbar^2 V(x)$ ,  $E < V_c$ ,  $V_c(x) =$  висота потенціальних бар'єрів. Як показано в [3], провідність мезокристала в двовимірному випадку виражається через одновимірну провідність, а та в свою чергу виражається через коефіцієнт трансмісії  $T$  співвідношенням Ландауера – тому зручно аналізувати саме величину  $T$ .

Розв'язок цього рівняння показує, що домішки чинять сильний вплив на енергетичний спектр мезокристала. Так, зокрема, під впливом домішків можливим є майже повне відновлення плато, зруйноване в мезокристалі надгратковою модуляцією потенціалу. Також під дією розсіювачів відбувається суттєвий зсув резонансів по осі енергій, деякі з них можуть опуститися в підбар'єрну область. Резонанси стають менш гострими, відстань між ними зростає. Варто зауважити, що при великих товщинах бар'єрів максимальне значення  $T$  стає помітно меншим від одиниці; в цій ситуації присутність домішків може приводити до значного зростання  $T$ .

Іншою сучасною напівпровідниковою структурою, в якій можна корисно поєднати властивості квантових хвильоводів та ТРС, є L-подібний електронний хвильовод. В підрозділі 5.2 розраховується коефіцієнт проникності електронної хвилі через такий хвильовод, в кут якого пропонується ввести потенціальний бар'єр, що містить глибокі домішкові центри; хвильовод схематично зображено на рисунку 4. Створити умови для резонансного тунелювання в даній системі можна по-різному; ми спинились на варіанті, в якому використовуються дві площини глибоких рівнів, розташовані в областях 2 та 5. В кожній секції хвильоводу змінні у відповідному рівнянні Шредінгера розділяються, і його розв'язок має таку загальну форму

$$\Psi_{n,m} = \left( A_{n,m} e^{i k_z z; n,m} + B_{n,m} e^{-i k_z z; n,m} \right), \quad (14)$$

де  $z$  відноситься до осі, вздовж якої поширюється електронна хвиля,  $k_z$  –  $z$ -вий компонент хвильового вектора, а  $n$  і  $m$  це модові індекси зв'язаних станів розв'язків в  $x$  та  $y$  напрямках. Для зшивання хвильових функцій на межах розділу різних секцій використовується метод модового зшивання; система рівнянь для коефіцієнтів власних функцій розв'язується чисельно а коефіцієнт трансмісії шукається за формулою

$$T = \frac{\sum \frac{\kappa_0}{\kappa_1} |C_{z,p}|^2}{\dots}, \quad (15)$$

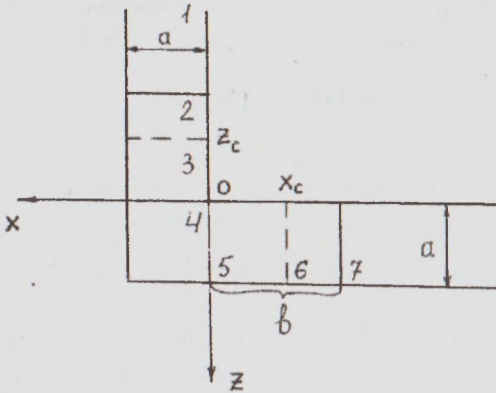


Рис.4. Схематичне зображення L-подібного квантового дроту

де підсумовування ведеться по всіх транспортних каналах.

Основним результатом проведених обчислень є те, що значення коефіцієнта проникності  $T$  при певних параметрах може бути близьким до одиниці – це означає, що в запропонованому квантовому хвильоводі відбивання електронної хвилі в куті завдяки резонансному тунелюванню практично не проявляється (для резонансних енергій). Оскільки таке відбивання приводить до значного зменшення величини  $T$  в аналогічних хвильоводах без домішків, то висновком є те, що розглядувана тут структура може слугувати для підвищення електронної трансмісії, особливо у випадках, коли прямокутними елементами сполучаються декілька хвильоводів.

Для досягнення більшої гнучкості у регулюванні енергетичних спектрів використовуються НГ із більш складним базисом, ніж прості прямокутні бар'єри. До таких структур відносяться і альтерновані надгратки (АНГ). В розділі 5 аналізуються АНГ із змінною товщиною бар'єрів; обчислюються енергетичні спектри різних типів АНГ без та з глибокими домішками в бар'єрах. Розрахунок проводиться в рамках наближення ефективної маси за допомогою методу трансформатриць.

Зауважимо перш за все, що спектри АНГ є надзвичайно різноманітними та багатими. Вони істотно залежать від таких чинників, як кількість періодів у гратці (зокрема, парна чи непарна), який бар'єр (товщий чи тонший) є першим по відношенню до падаючої електронної хвилі і т.і.. Важливо, що введення домішок

вже в один (з усіх) бар'єр приводить до сильної модифікації енергетичних спектрів, при цьому спектри можуть змінюватись докорінно, а розглядувана система є абсолютно несиметричною до введення домішок в різні бар'єри: наявність глибоких центрів в кожному іншому бар'єрі має свою специфічну дію на спектри.

Для ілюстрації сказаного на рисунку 5 наведено тунельні спектри для чотирибар'єрної АНГ, збудованої на базі структури Si-SiC. Кривий 5.1 відповідає випадок відсутності домішок в НГ ( $\beta = 0$ ), для інших  $\beta = -0.08$  ат.од., але для кривих 5.2, 5.3, 5.4, 5.5 домішки існують лише в 1-му, 2-му, 3-му, 4-му бар'єрі відповідно для зручності ці спектри позначено як В1, В2, В3, В4). Видно, що у разі В4 якраз на місці забороненої зони утворюється інтервал енергій із  $T \sim 1$ ; для В1, навпаки, заборонена зона поглиблюється.

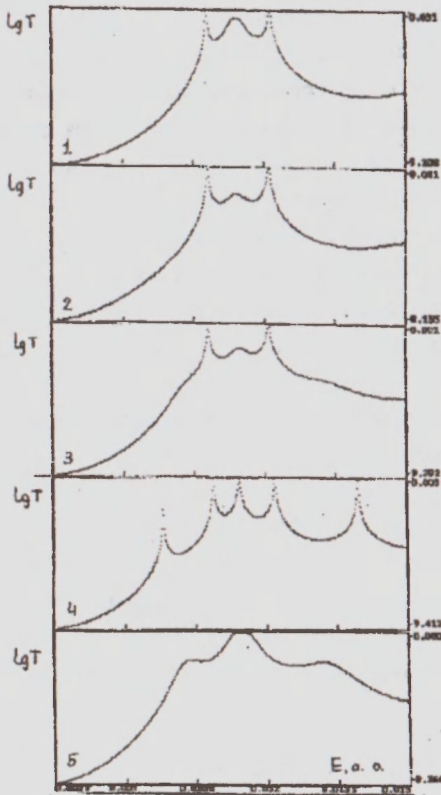


Рис.5. тунельні спектри АНГ з 4-ма бар'єрами для різних параметрів спектру

практично не проявляються, так що можна говорити про їх знищення. Різноманітні модифікації спектрів можна одержати, вводячи домішки в декілька бар'єрів одночасно. Інші можливості регулювання спектрів АНГ наведено в тексті дисертації. Найбільший вплив на спектри домішки чинять в тих випадках, коли вони введені в пеший чи останній бар'єри, але дія їх на спектри в цих двох випадках дуже відрізняється.

Таким чином, показано, що введення глибоких центрів у бар'єри альтернативних ТРС дає змогу одержувати різноманітні варіації енергетичних спектрів розглядуваних структур.

В розділі 5 також проаналізовано енергетичний спектр дефектної НГ з розсіювачами в потенціальних бар'єрах. Розрахунок проведено для конкретного виду дефектів, зумовленого тим, що ширина однієї з ям НГ є більшою від інших.

Якщо вище мова йшла про дослідження, об'єктами яких були нові гні структури, то в 6-му розділі розглядається добре вивчена і широко застосовувана структура – контакт метал-напівпровідник. Показується можливість виникнення негативного диференціального опору в бар'єрі Шоткі, область просторового заряду (ОПЗ) якого містить глибокі домішкові центри. Розглядається контакт металу з напівпровідником п-типу, неосновними носіями заряду нехтуємо. Раніше було показано, що в КМН з глибокими центрами можливим і суттєвим є тунельно-резонансний струм, тобто струм, при якому електрони проходять ОПЗ із “пересадкою” на домішках. Вважалося, що глибокі домішки розподілені в ОПЗ однорідно. В даному розділі дисертації знаходяться вольт-амперні характеристики для тунельно-резонансного струму для довільних профілів розподілу глибоких центрів в розглядуваній структурі.

Вольт-амперні залежності можна одержати, виходячи із відомого квантово-механічного виразу для густини струму імовірності

$$j = \frac{e\hbar}{2mi} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \quad (16)$$

Необхідні для цього хвильові функції можна виразити через одночастинкову функцію Гріна задачі, в якій враховується як потенціал домішкового центра, так і наявність потенціального бар'єра ОПЗ. Короткодійуючий потенціал глибокого центра моделюється  $\delta$ -подібною функцією. Результат обчислення власної функції має такий вигляд

$$\Psi(\vec{r}, E) = \Psi^o(\vec{r}, E) + \Psi^s(\vec{r}_o, E) \frac{G_o(\vec{r}, \vec{r}_o, E)}{\epsilon_o(\vec{r}_o, \vec{r}_o, E(z_o)) - \epsilon_o(\vec{r}_o, \vec{r}_o, E)} \quad (17)$$

де  $\Psi(\vec{r}, E)$  - хвильова функція електрона в ОПЗ без домішок,  $G_e(\vec{r}, \vec{r}', E)$  - відповідна функція Гріна,  $E(z_0) = \varphi(z_0) - E$ ,  $\varphi(z)$  потенціальна енергія в ОПЗ, а домішка є локалізованою в точці  $\vec{r}_0' = (\vec{R}, z_0)$ .

Для того, щоб знайти повний резонансний струм, треба, по-перше, підсумувати внески в струм від електронів з різною енергією  $E$ , по-друге, включити в розгляд всю сукупність домішкових центрів. Тоді повний резонансний струм визначається виразом

$$J = \sum_{z_0, E} j(z_0, E) f(E), \quad (18)$$

де  $f(E)$  - функція розподілу електронів за енергіями.

В результаті подальших обчислень тунельно-резонансний струм можна подати у такому вигляді

$$J = F (8 E_t m^5)^{1/2} \int dz N(z) f(\varphi_B - \xi E_t) \mathcal{D}(\xi), \quad (19)$$

де  $\varphi_B$  та  $E_t$  - висота потенціального бар'єра ОПЗ та потенціал іонізації глибокого центра відповідно,  $F$  - напруженість поля в ОПЗ (вважається сталою величиною),  $\xi = 1 + Fz/E_t$ ,

$$\mathcal{D}^{-1}(\xi, F) = T(\xi, F) + T(0, F), \quad T(x, F) = |x^{1/2} - 1| e^{4/3 \frac{(2m)^{1/2} E_t^{-3/2}}{F} |x^{3/2} - 1|}$$

У разі однорідного розподілу домішок  $N(z) = \text{const}$ , інтегрування по  $z$  приводить до монотонно зростаючої (із збільшенням  $F$ ) ВАХ; водночас зрозуміло, що при іншому виборі  $N(z)$  можливі і немонотонні залежності. Зупинимось далі на випадку наявності домішків лише у вузькому шарі напівпровідника всередині його ОПЗ - цей випадок включає в себе і ситуацію, відому під назвою  $\delta$ -легуння. Конкретний розрахунок проведемо, задаючи гаусову форму для  $N(z)$ .

Аналіз показує, що в розглядуваному випадку може реалізуватись негативний диференціальний опір (НДО). Якщо описувати ВАХ, задаючи її диференціальний нахил  $\alpha = d \ln J / dV$ , то в області НДО для  $\alpha$  одержуємо (виконується умова

$$\varphi_B - E_t - Fz < 0): \quad \alpha = \frac{2F}{\varphi_0 + V} \left\{ m \sigma z_0 - \frac{(2m)^{1/2}}{3F^2} \left[ \frac{3}{E_t} \left( \frac{Fz_0}{E_t} + 1 \right)^{1/2} \left( \frac{Fz_0}{2E_t} - 1 \right) + 1 \right] \right\}. \quad (20)$$

Зауважимо, що випадок вузької локалізації домішок в ОПЗ є більш вигідним з точки зору формування НДО.

При розрахунку тунельно-резонансного струму, а також в інших ситуаціях потрібно знати залежність імовірності тунельної іонізації глибокого стану  $\Gamma$  полем

ОПЗ від параметрів задачі. В 6-му розділі проводиться такий розрахунок величини  $\Gamma$  для випадку параболічного потенціалу ОПЗ, який вважається загальноприйнятним модельним наближенням для потенціалу в бар'єрі Шоткі. Імовірність польової іонізації глибокого стану обчислюється за формулою

$$\Gamma = \frac{J_m G^\circ(r_t, r_t; \varepsilon)}{\partial/\partial \varepsilon \operatorname{Re} G^\circ(r_t, r_t; \varepsilon)} \Big|_{\varepsilon_t} \quad (21)$$

де  $r_t$  – тривимірна координата домішки,  $J_m G^\circ$  і  $\operatorname{Re} G^\circ$  відповідно уявна та реальна частини функції Гріна рівняння для електрона в ОПЗ, в якому не враховується потенціал домішки,  $E_t$  – іонізаційний потенціал. Функція Гріна виражається через її спектральне представлення, а хвильові функції шукаються як розв'язок відповідного рівняння Шредінгера. Результати розрахунків свідчать про те, що область зміни величини  $\Gamma$  є дуже великою – імовірність тунельної іонізації глибокого центра може складати від  $10^{13} \text{ с}^{-1}$  до частин зворотньої секунди в залежності від форми потенціального бар'єра, а також від просторового та енергетичного положення домішки.

В останньому розділі висвітлюються деякі моменти, зв'язані з проблемою утворення глибоких станів в напівпровідникових структурах. В першому підрозділі розглядається задача врахування просторової дисперсії діелектричної проникності  $\varepsilon$  при побудові домішкових станів в напівпровідниках. Пропонується модель, яка якісно враховує просторову дисперсію  $\varepsilon$ ; показано, що ця проста модель забезпечує появу як глибоких, так і мілких зв'язаних на домішковому центрі станів. Розглядається система з гамільтоніаном

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{z^* e^2}{\varepsilon(r) r} \quad (22)$$

де  $z^*$  – ефективний заряд домішкового іона,  $m$  – ефективна маса електрона, а просторова дисперсія  $\varepsilon$  задається у вигляді

$$\varepsilon(r) = \begin{cases} 1, & r < a \\ \varepsilon_0, & r \geq a \end{cases} \quad (23)$$

де  $a$  – параметр, що відповідає "ввімкненню" макроскопічної діелектричної проникності  $\varepsilon$ . Рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (22) досліджується варіаційним методом. Аналіз показує, що існує певна критична точка  $a_k$  – так, що для значень параметра  $a$ , менших від  $a_k$ , утворюється мілкий рівень, в той час як у випадку  $a > a_k$  повинен виникнути глибокий рівень. При цьому величина  $a_k$  визначається як характеристиками кристала, так і домішкового центра. Конкретні розрахунки провадилися для системи: домішки атомів шостої групи таблиці Менделєєва – кисень, сірка, селен, телур – в кристали арсеніду галія. Домішкові атоми в даній моделі відрізняються лише ефективним зарядом їх іонів. Обчислені значення енергії

домішкових станів одержані за допомогою вибору такого значення параметра  $a$  для GaAs, яке забезпечує існування глибокого рівня для кисню – проте лише мілких рівнів для інших домішків. Одержані результати якісно узгоджуються з експериментом.

Таким чином, застосована проста модель показує, що врахування просторової дисперсії діелектричної проникності дає, мабуть, змогу пояснити факт появи як глибоких, так і мілких домішкових рівнів в напівпровідниках.

Також, в розділі 7 розраховується діелектрична функція для напівпровідників із вузькою забороненою зоною ( $E_g \sim 0$ ). Ця функція, як відомо, використовується при побудові тих чи інших моделей домішкових станів в напівпровідниках. Для обчислення діелектричної проникності використовується добре відомий вираз, одержаний в рамках наближення випадкових фаз методом самоузгодженого поля

$$\epsilon(\vec{q}) = 1 + \frac{4\pi}{a^2} \sum_{n, n', k, k'} \frac{|\langle n, \vec{k} | e^{i(\vec{q}, \vec{r})} | n', \vec{k}' \rangle|^2}{E_{n'k'} - E_{nk}} \quad (24)$$

(атомні одиниці). Для того, щоб розрахувати величину  $\epsilon$ , необхідно знати зонну структуру кристала: енергетичний спектр  $E_n(k)$  і власні функції  $|n, k\rangle$ . В рівнянні (24) - числа заповнення блохівських станів. В даній роботі використовується реальна – кейнівська – модель зонної структури, яка, як відомо, добре підходить до напівпровідників з вузькою забороненою зоною. Обчислення спочатку проводяться із застосуванням відносно простого гамільтоніану, в якому нехтується спін-орбітальним розщепленням, а вплив верхніх зон враховується в спрощеній формі. Таке наближення виявляється достатнім для того, щоб одержати аналітичну залежність діелектричної проникності від дійсних параметрів напівпровідників (таких, як мінімальна ширина забороненої зони, ефективна маса носіїв заряду, стала ґратки), яка якісно узгоджується з експериментальними фактами. Далі проводяться розрахунки в більш складній моделі зонної структури напівпровідників.

Отже, розглянемо напівпровідник, зонна структура якого описується таким гамільтоніаном

$$\hat{H} = \sum_{n, n'} \langle n, k | \hat{H} | n', k \rangle, \quad n, n' = 1, 2, 3, 4,$$

$$\langle n, k | \hat{H} | n', k' \rangle = (-E_g - \beta k^2)(1 - \delta_{nn'}) \delta_{nn'} - \alpha k^2 \delta_{n1} \delta_{n'4} + \quad (25)$$

$$+ \rho k \alpha(n) (\delta_{n1} + \delta_{1n'}) (1 - \delta_{nn'}), \quad \alpha(n) = \alpha, \alpha^2, \quad n = 2, 3, 4,$$

де  $E_g$  – мінімальна ширина забороненої зони,  $\rho$  – матричний елемент імпульсу, а члени  $\alpha k^2, \beta k^2$  відповідають за вплив верхніх зон. Знаходячи енергетичний спектр та власні функції, які відповідають гамільтоніану (25), можна обчислити і матричні елементи, що входять у вираз для  $\epsilon$ . Для діелектричної проникності

зрештою одержуємо

$$\varepsilon(q) = 1 + \frac{8\pi}{q^2} \left( \sum_{\vec{k}} \frac{\eta\eta' - E_g^2 - 4\rho^2|\vec{k}||\vec{k} + \vec{q}|}{\eta\eta'(\eta + \eta')} + \sum_{\vec{k}} \frac{(\eta' - E_g)q^2 \sin^2\theta}{\eta'(\eta' + E_g)|\vec{k} + \vec{q}|^2} \right), \quad (26)$$

$$\text{де } \eta^2 = [E_g + (b-a)k^2]^2 + 4k^2\rho^2, \quad \eta' = [E_g^2 + 4\rho^2(\vec{k} + \vec{q})^2]^{1/2}.$$

Другий член в правій частині рівняння ( 26 ) відповідає віртуальним переходам між s-дірковою зоною та зоною провідності, а третій член – між l, h - дірковими зонами та зоною провідності.

Для довгохвильової межі діелектричної проникності, інтегруючи рівняння (26) по всіх значеннях  $k$ , що знаходяться всередині кулі, рівною за об'ємом першої зони Брилюена (з радіусом  $\kappa$  ), одержуємо

$$\varepsilon(q \rightarrow 0) = 1 + \frac{8}{9\pi} \frac{\rho^2 \kappa^2}{E_p^{3/2}} + \frac{16}{3\pi\rho} \left\{ \ln \frac{(E_p^{1/2} + E_g)^{1/2} + (E_p^{1/2} - E_g)^{1/2}}{(2E_g)^{1/2}} - \frac{[E_p^{1/2} - E_g]^{1/2}}{[E_p^{1/2} + E_g]^{1/2}} \right\}, \quad (27)$$

$$E_p = E_g^2 + 4\rho^2\kappa^2.$$

Цей вираз можна значно спростити, якщо взяти до уваги нерівність, що добре виконується:  $E_g \ll 2\rho\kappa$ . Тоді маємо

$$\varepsilon(q \rightarrow 0) = 1 + \frac{1}{9\pi\rho} + \frac{16}{3\pi\rho} \left( \frac{1}{2} \ln \frac{4\rho\kappa}{E_g} - \frac{1}{2} \right). \quad (28)$$

Зауважимо, що поява основного (останнього) члена в формулі (28) є прямим наслідком того, що існує не одна, а декілька діркових зон. Діелектрична стала логарифмічно зменшується із збільшенням щільності між зоною провідності та валентною зоною. Тут використовується спрощена модель зонної структури, тому чим меншою є заборонена зона, тим краще виконується закон (28). Одержана слабка залежність діелектричної проникності від  $E_g$  підтверджується для ряду напівпровідників типу  $A_3B_5$  (таких, як InSb, InAs, InP, GaAs, GaSb).

Одержані вирази для  $\varepsilon$  дають можливість проаналізувати її для випадків безщільових напівпровідників. Як впливає із рівняння (27), має місце повне екранування зовнішнього поля на далеких відстанях у випадку, коли  $E_g = 0$  та у разі, якщо  $E_g < 0$ . В першому з цих випадків зона провідності має конічну форму при малих  $k$ , а в другому зона провідності є параболічною. Це означає якісно різні залежності від  $q$  при  $q \rightarrow 0$  для таких зонних структур:

а)  $E_g > 0$ ;  $\varepsilon(q \rightarrow 0)$  має скінченну величину, що визначається ( 27 );

б)  $E_g = 0$ ; рівняння ( 27 ) дає 
$$\varepsilon(q \rightarrow 0) = 1 + \frac{1}{\pi\rho} \left( 1 + \frac{8}{3} \ln \frac{\kappa}{q} \right).$$

В цьому разі потенціал точкового заряду поводить себе, як

$$V(r) = \left[ r \left( 1 + \frac{1}{\pi\rho} + \frac{8}{3\pi\rho} \ln \kappa r \right) \right]^{-1}$$

на великих відстанях від центра;

в)  $E_g < 0$ ;

$$\varepsilon(q) \approx \frac{2\gamma |E_g|}{\rho^2 q} \begin{cases} 1, & \Delta = 0 \\ (3/2)^2, & \Delta \gg \rho q \end{cases}$$

де  $\Delta$  – величина спін-орбітального розщеплення (остання залежність одержана із використанням точнішого гамільтоніану, ніж ( 25 )). Таким чином, ефект екранування в безцілових напівпровідниках з параболічною зоною провідності є сильнішим, ніж в кристалах із конічною зоною провідності, але є слабкішим, ніж в металах.

Підрозділ 7.2 присвячений іншому питанню, зв'язаному з проблемою утворення глибоких станів. Якщо звичайно в тунельно-резонансних структурах розглядаються зв'язані електронні стани, які утворюються при русі носіїв заряду в просторі, обмеженому гетеромежами, то тут аналізуються стани дещо іншої природи. Показується, що зв'язатись на домішковому потенціалі можуть електрони, які рухаються в перпендикулярному до гетеромеж напрямку. Розглядається симетрична ДБТРС, в області квантової ями якої існує домішковий потенціал. Енергетичний спектр даної задачі можна описати, знайшовши функцію Гріна системи із збурюючим потенціалом, тобто розв'язавши рівняння, аналогічне ( 1 ). Розв'язок показує, що в досліджуваній системі можуть виникати глибокі електронні стани; найбільш характерною їх рисою є те, що залежність енергії зв'язаного стану від ширини квантової ями, а також від висоти бар'єрів, має осцилюючий характер.

#### Цитована література.

1. Beltram F., Capasso F. Interaction phenomena between deep levels and minibands in semiconductor superlattices // Phys.Rev. B.-1988.-38.-P.3580-3582.
2. Шека Д.И. Теория электронных процессов в контактной структуре металл-полупроводник : Дис... доктора физ.мат. наук: 01.04.10.- К., 1985. -398с.
3. Ulloa S., Castano E., Kirchenov G. Ballistic transport in a novel one dimensional superlattice // Phys. Rev. B.-1990.-41.-P. 12350-12357.

#### Висновки.

В дисертації одержано і проаналізовано тунельні спектри невпорядкованих напівпровідникових надграток з глибокими домішковими центрами в потенціальних бар'єрах. Показано, що властивості таких НГ кардинально відрізняються від властивостей невпорядкованих граток без розсіювачів, зокрема, один з деже важливих результатів полягає в тому, що при внесенні домішок в бар'єри невпорядкована НГ може стати абсолютно прозорою при певних – резонансних – енергіях (в широкому інтервалі значень параметрів). При цьому спостерігається значне – на порядки – збільшення максимального значення коефіцієнта тунельної трансмісії електрона крізь ґратку.

Проведено детальний аналіз тунельних спектрів неупорядкованих надграток в залежності від параметрів задачі. При цьому розглянуто різні типи неупорядкованих НГ, а також ґратки, що знаходяться в зовнішньому однорідному електричному полі.

Одержано інший цікавий результат, а саме, немонотонну залежність коефіцієнта прозорості від товщини потенціальних бар'єрів неупорядкованої надґратки з глибокими центрами.

Таким чином, доведено сильний конструктивний вплив глибоких центрів на процеси в неупорядкованих надґратках: продемонстрована можливість делокалізації електронних станів із відповідними наслідками в їх транспортних властивостях.

Запропоновано нові версії квазіперіодичних напівпровідникових надґраток – в яких модулюючий квазіперіодичний потенціал створюється за допомогою глибоких домішок. Доведено принципову можливість утворення квазіперіодичної модуляції тільки за рахунок глибоких центрів – без залучення інших факторів квазіперіодичності, тобто показано, що введення глибоких домішок в періодичну НГ є самодостатньою причиною для виникнення квазіперіодичної модуляції потенціалу.

Досліджено декілька версій квазіперіодичних напівпровідникових надґраток Фібоначчі. Проаналізовано особливості енергетичних спектрів, в тому числі інваріанта, зазначених структур. Показано, що запропоновані версії надґраток Фібоначчі мають певні переваги перед відомими в літературі з точки зору їх практичного дослідження і використання.

Запропоновано новий тип квазіперіодичних ієрархічних надґраток, квазіперіодична модуляція яких створюється глибокими центрами. Проаналізовано характер енергетичних спектрів таких надґраток (зокрема, в зовнішньому однорідному електричному полі).

Показано, що введення домішкових центрів в мезоскопічний кристал (одновимірну балістичну надґратку) дає змогу в широких межах, цілеспрямовано регулювати енергетичний спектр останнього.

Доведено можливість резонансного тунелювання в L-подібному квантовому дроті (хвильоводі) крізь бар'єр з домішковими центрами, який запропоновано вводити в кут цієї структури. Проаналізовано транспортні властивості такого хвильоводу і показано, що завдяки домішкам можна досягати суттєвого зменшення втрат в потужності електронної хвилі при проходженні її через хвильовод.

Таким чином, продемонстровано можливість за допомогою домішкових центрів суттєво поліпшувати транспортні властивості і широко регулювати тунельні характеристики таких напівпровідникових наноструктур, як мезоскопічний

кристал та L-подібний квантовий хвильовод, тобто таких об'єктів, в яких поєднуються або комбінуються властивості тунельно-резонансних та низьковимірних структур.

Одержано результати аналізу енергетичного спектра дефектної надгратки з розсіювачами в потенціальних бар'єрах (макроскопічний дефект зумовлений тим, що ширина однієї із квантових ям відрізняється від інших).

Розраховано і проаналізовано енергетичні спектри такого важливого напівпровідникового об'єкту, як альтерновані надгратки. Проаналізовано енергетичні спектри різних типів альтернованих НГ з неоднаковими товщинами бар'єрів. Виявлено важливі особливості спектрів вказаних структур; показано, що розглядувані спектри є дуже чутливими до введення глибоких домішків в бар'єри альтернованих надграток.

Одержано результати розрахунку імовірності тунельної іонізації глибокого домішкового центра поблизу вільної поверхні напівпровідника за рахунок ізоенергетичних електронних переходів з об'ємних станів в таммівську зону поверхневих станів.

Розраховано імовірність польової іонізації глибокого центра в області просторового заряду, потенціальний рельєф якої описується параболічним законом.

Два останні ефекти можуть відігравати важливу роль в фізичних процесах в бар'єрних структурах.

Показано, що енергетичні спектри таких найбільш вивчених тунельно-резонансних структур, як двобар'єрна ТРС, асиметричні подвійні квантові ями істотно залежать від наявності глибоких домішкових центрів в потенціальних бар'єрах, і отже, за допомогою останніх можна досягати бажаних модифікацій енергетичних спектрів вказаних структур.

Доведено можливість виникнення явища негативного диференціального опору в контакті метал-напівпровідник, в області просторового заряду якого існують глибокі домішкові центри. Одержано вирази для відповідних вольт-амперних характеристик і виявлено найкращі умови для утворення негативного диференціального опору.

Досліджено декілька питань, зв'язаних з проблемою утворення глибоких домішкових станів, а саме: 1) продемонстровано можливість утворення глибоких домішкових станів в двобар'єрній тунельно-резонансній структурі, коли на домішковому потенціалі в області квантової ями зв'язується електронна хвиля, що рухається перпендикулярно до гетеромереж; 2) показано, що врахування самого факту просторової дисперсії діелектричної проникності  $\epsilon$ , а точніше того, що  $\epsilon = 1$  на малих відстанях від домішкового центра, дозволяє вже в простій моделі одержувати як мілкі, так і глибокі рівні в забороненій зоні напівпровідників; 3) на базі методу кр збурень в реалістичній моделі зонної структури напівпровідників одержано

прості аналітичні вирази для діелектричної проникності для різних типів безщільових напівпровідників в залежності від параметрів кристала; показано, що внесок в діелектричну проникність вузькозонних напівпровідників (з кейнівської моделлю зонної структури) від спин-відщепленої зони, на відміну від зон легких та важких дірок, є регулярним при малих значеннях мінімальної ширини забороненої зони.

Результати дисертації опубліковано в таких роботах.

1. Шека Д. И., Шека В.И., Король А.Н. Диэлектрическая проницаемость узкозонных кубических кристаллов // Тезисы докладов Восьмого совещания по теории полупроводников.-К.: Наукова думка.-1975.-С.175.
2. Sheka D.I., Korol A.N. Dielectric permittivity of semiconductors with narrow forbidden gap in the long-wave limit // Phys.Stat.Sol. (b).-1976. №2.-P.413-418.
3. Шека Д.И., Шека В.И., Король А.Н. Диэлектрическая проницаемость узкозонных кубических кристаллов // ФТТ.-1976.-18.-№10.-С.2887-2892.
4. Шека Д.И., Шека В.И., Король А.Н. Пространственная дисперсия диэлектрической проницаемости в полупроводниках типа InSb // ФТТ.-1977.-19.-№10.-С.3155-3158.
5. Король А.Н., Стриха В.И., Шека Д.И. Туннельный механизм релаксации глубокого центра с туннельным резонансным током в ОПЗ полупроводников // Тезисы докладов Девятого совещания по теории полупроводников.-Тбилиси.-1978.-С229.
6. Король А.Н., Шека Д.И. Туннельный резонансный ток с участием глубоких уровней в диодах Шоттки // Физические процессы в полупроводниковых приборах с барьером Шоттки.-К.: Наукова думка.-1979.-С.123-128.
7. Король А.Н., Стриха В.И., Шека Д.И. Туннельный резонансный ток в контакте металл-полупроводник // ФТП.-1980.-14.-№6.-С.1180-1185.
8. Король А.Н. Вероятность туннельной ионизации глубокого центра в области пространственного заряда // УФЖ.-1988.-18.-С.875.
9. Шека Д.И., Воскобойников А.М., Король А.Н. Вероятность ионизации глубокого центра вблизи свободной поверхности полупроводника // Поверхность. Физика, химия, механика.-1983.-1.-№9.-С.21-24.
10. Король А.Н., Шека Д.И., Стриха В.И. О возможности получения отрицательного дифференциального сопротивления в диодах Шоттки // Известия вузов. Физика.-1990.-№10.-С.120-122.
11. Король А.М. Прозорість неупорядкованої суперґратки, складеної із потенціальних бар'єрів та квантових ям із розсіюючими центрами всередині бар'єрів // Тези доповідей 1 Української конференції "Структура і фізичні властивості неупорядкованих систем"-частина 1.-Львів.-1993.-С.14.
12. Korol A.M. Effect of scattering in the potential barriers on the tunneling transparency of a disordered superlattice // Physical Review B.- 1994.- 50.- №4.- P.- 2661-2663.
13. Дослідження енергетичного спектру двобар'єрної тунельно-резонансної структури з домішками методом функцій Гріна / Король А.М.; УДУХТ.-Київ, 1994.-5с.-

- Укр.-Деп. в ДНТБ України 22.08.1994, №1735 -Ук 94// Анот. в ВИНІТИ РАН, №11, 1994.
14. Про залежність енергетичного спектру однобар'єрної структури з домішками від її параметрів / Король А.М.; УДУХТ.-Київ, 1994.-5с. -Укр.-Деп. в ДНТБ України 22.08.1994, №1733 -Ук 94 // Анот. в ВИНІТИ РАН, №11,1994.
15. Korol A.M. On tunneling spectra of a new version of Fibonacci superlattices // *Physica Status Solidi (b)*.-1994.-183.-P.K51-K53.
16. Король А.Н. Об энергетическом спектре иерархической сверхрешетки с примесями в потенциальных барьерах // *Письма в ЖЭТФ*.-1994.-59.-№10.-С.659-662.
17. О зависимости энергетического спектра двубарьерной туннельно-резонансной структуры с примесями от ее параметров / Король А.Н.; УДУХТ.-Київ, 1994. 5с. - Рус.-Деп. в ДНТБ України 22.08.1994, №1739 -Ук 94 // Анот. В ВИНІТИ РАН, №11, 1994.
18. Король А.Н. Туннельные спектры полупроводниковых сверхрешеток Фибоначчи с примесями в потенциальных барьерах // *УФЖ*.-1995.-40.-№7.-С.749-751.
19. Король А.Н. О зонной структуре нового варианта сверхрешеток Фибоначчи // *ФТТ*.-1994.-36.-№8.-С. 2339-2342.
20. Король А.Н. О туннельном спектре неупорядоченных полупроводниковых сверхрешеток с примесями в барьерах // *УФЖ*.-1995.-40.-№7.-С.748-749.
21. Король А.Н. О резонансном туннелировании через примесные центры в L-образном электронном волноводе // *Поверхность. Физика, химия, механика*.-1995.-№6.-С.106-109.
22. Король А.М. Прозорість неупорядкованої надгратки з розсіюючими центрами в потенціальних бар'єрах // *УФЖ*.-1995.-40.-№4.- С. 374-376.
23. Король А.Н. О туннельной прозрачности неупорядоченной сверхрешетки с рассеивателями в потенциальных барьерах // *ЖЭТФ*.-1994.-106.-№2(8).- С. 499-502.
24. Король А.Н. О немонотонной зависимости туннельной прозрачности от толщины барьеров для неупорядоченной сверхрешетки с примесями в барьерах // *ФТП*.-1995.-29.-№10.-С.1844-1846.
25. Korol A.M. Transmittivity of a disordered superlattice with impurities in the potential barriers // *Physics, Chemistry and Application*.-Minsk.-1995.-P.281-282.
26. Korol A.M. Dependence of tunneling transparency of the disordered superlattice on the parameters of impurity centers located inside the barriers // *Physical Review B*.-1996.- 53.-№15.-P. 9548-9549.
27. Король А.Н. О транспортных характеристиках мезоскопического кристалла с примесями в потенциальных барьерах // *Физика низких температур*.-1996.-22.-№4.-438-441.
28. Korol A.M. Transmittivity of a disordered superlattice with the scatterers inside barriers in the external electric field // *Abstracts of the International School-Conference "Physical problems in material science of semiconductors"*.-Chernivtsi.-1995.-P.193.

29. Korol A.M. On the deep impurity states in the quantum well of the double barrier resonant structure // Abstracts of the International School-Conference "Physical problems in material science of semiconductors".- Chernivtsi.-1995.-P.278.

#### Анотація.

Король А.М. Резонансне тунелювання за участю глибоких центрів в напівпровідникових структурах та зв'язані з ним ефекти. -Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.10.-Фізика напівпровідників і діелектриків. Київський університет Тараса Шевченка, Київ, 1998.

В дисертації представлено результати теоретичних досліджень процесу резонансного тунелювання за участю глибоких станів в напівпровідникових структурах і зв'язаних з ним ефектів. Розраховуються і аналізуються енергетичні спектри двобар'єрної тунельно-резонансної структури, асиметричних подвійних квантових ям, надграток з макродфектами за умови, що в потенціальних бар'єрах вказаних структур знаходяться глибокі центри. Показано, що глибокі домішки кардинальним чином змінюють тунельні спектри неупорядкованих надграток різних типів. Пропонуються нові версії квазіперіодичних надграток Фібоначчі, а також ієрархічних НГ і аналізуються їх спектри. Продемонстровано сильний вплив розсіювачів на енергетичні спектри мезокристалів, транспортні властивості L-подібних квантових хвильоводів, тунельні спектри альтернованих надграток різних типів, характеристики контакту метал-напівпровідник. Розглянуто також деякі питання утворення глибоких станів в напівпровідниках.

Ключові слова: глибокі стани (центри), резонансне тунелювання, тунельні спектри, неупорядковані надгратки, квазіперіодичні надгратки, мезокристали, квантовий хвильовод, тунельно-резонансні структури, альтерновані надгратки, контакт метал-напівпровідник.

#### Аннотация.

Король А.Н. Резонансное тунелирование с участием глубоких центров в полупроводниковых структурах и связанные с ним эффекты. -Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.10.-Физика полупроводников и диэлектриков. Киевский университет Тараса Шевченко, Киев, 1998.

В диссертации представлены результаты теоретических исследований процесса резонансного тунелирования с участием глубоких состояний в полупроводниковых структурах и связанных с ним эффектов. Рассчитываются и анализируются туннельные свойства неупорядоченных полупроводниковых сверхрешеток с глубокими примесными центрами в потенциальных барьерах. Показано, что эти свойства кардинально отличаются от свойств неупорядоченных сверхрешеток без примесей, в частности, при внесении рассеивателей в потенциальные барьеры неупорядоченная решетка может стать почти абсолютно прозрачной при определенных

резонансных энергиях. Проведен детальный анализ туннельных спектров неупорядоченных сверхрешеток разных типов в зависимости от параметров задачи. Предложены новые версии квазипериодических сверхрешеток, в которых квазипериодический модулирующий потенциал создается с помощью глубоких примесей. Исследовано несколько версий квазипериодических полупроводниковых сверхрешеток Фибоначчи, а также один из вариантов иерархической сверхрешетки. Проанализированы особенности энергетических спектров, в том числе инварианта, указанных структур. Показана возможность существенного улучшения и широкого регулирования с помощью примесных центров туннельных характеристик таких полупроводниковых наноструктур, как мезоскопический кристалл и L-образная квантовая проволока, то-есть таких объектов, в которых комбинируются свойства низкоразмерных и туннельно-резонансных структур. Рассчитаны и проанализированы энергетические спектры альтернированных полупроводниковых сверхрешеток. Выявлены важные их особенности; показано, в частности, что рассматриваемые спектры являются очень чувствительными ко введению глубоких примесей в барьеры альтернированных сверхрешеток. Проведен расчет вероятности туннельной ионизации глубокого примесного центра вблизи свободной поверхности полупроводника за счет изоэнергетических электронных переходов из объемных состояний в таммовскую зону поверхностных состояний. Рассчитана вероятность полевой ионизации глубокого центра в области пространственного заряда, потенциальный рельеф которой описывается параболическим законом. Два последних эффекта могут играть существенную роль в физических процессах в барьерных структурах. Показано, что энергетические спектры таких туннельно-резонансных структур, как двубарьерная ГРС, асимметричные двойные квантовые ямы, сверхрешетки с макродефектами существенно зависят от наличия глубоких примесных центров в потенциальных барьерах и, следовательно, с помощью последних можно реализовывать желаемые модификации указанных структур. Показана возможность возникновения явления отрицательного дифференциального сопротивления в контакте металл-полупроводник, в области пространственного заряда которого существуют глубокие центры; получены выражения для соответствующих вольт-амперных характеристик. Рассматриваются также некоторые вопросы образования глубоких состояний в полупроводниках и полупроводниковых структурах.

Ключевые слова: глубокие состояния (центры), резонансное туннелирование, туннельные спектры, неупорядоченные сверхрешетки, квазипериодические сверхрешетки, мезокристаллы, квантовые волноводы, туннельно-резонансные структуры, альтернированные сверхрешетки, контакт металл-полупроводник.

#### Abstracts.

Korol A.M. Resonant tunneling with the participation of deep centers in the semiconductor structures and effects associated with it.

The theses for a degree of the doctor of physical and mathematical sciences on a speciality 01.04.10.- Physics of semiconductors and dielectrics., Taras Shevchenko Kyiv

university, Kyiv, 1998.

Results of the investigation of theoretical study of the resonant-tunneling process with the participation of deep states in semiconductor structures as well as the effects associated with this process are presented in these theses. Energy spectra of the double-barrier resonant-tunneling structure, asymmetric double quantum wells, superlattices with macrodefects are calculated and analyzed under the condition that deep centers are incorporated into potential barriers of these structures. It is demonstrated that deep states change the tunneling spectra of the disordered superlattices of various types crucially. New versions of quasiperiodical Fibonacci superlattices as well as the hierarchical superlattices are proposed and their spectra are analyzed. Strong effect of the scatterers on the energetical spectra of mesocrystals, transport properties of the L-shaped quantum waveguides, tunneling spectra of the alternated superlattices of various types, the characteristics of the metal-semiconductor junctions is demonstrated. Certain problems of the creation of deep states in the semiconductors are also considered.

**Key words:** deep states (centers), resonant tunneling, tunneling spectra, disordered superlattices, quasiperiodic superlattices, mesocrystals, quantum waveguides, resonant-tunneling structures, alternated superlattices, metal-semiconductor junction.