

**Аделина Митева Митева**

**ПОЛУПРОВОДНИКОВИ КВАНТОВИ ЯМИ С ПРОМЕНЛИВ  
СЪСТАВ ПОД ВЛИЯНИЕ НА ПОСТОЯННО ЕЛЕКТРИЧНО  
ПОЛЕ С ПОТЕНЦИАЛ ЗА НАЗЕМНИ И КОСМИЧЕСКИ  
ПРИБОРНИ ПРИЛОЖЕНИЯ**

**А В Т О Р Е Ф Е Р А Т**

на дисертация за получаване на образователната и научна степен  
„ДОКТОР“

**Научен консултант:**  
**проф. д-р Димитър Теодосиев**  
ИКИТ, БАН

Дисертационният труд е изложен на 150 страници и включва **57** фигури и **5** таблици.

Цитирани са **190** литературни източника. Номерата на фигурите и таблиците в автореферата съответстват на тези в дисертационния труд.

Дисертационната работа е обсъдена на специализирано заседание на Научния семинар на секция “Космическо материалознание” при ИКИТ-БАН на 28.02. 2019 г.

Защитата на дисертационната работа ще се състои на 28.05.2019 от 14 ч. в зала 309 на Института за космически изследвания и технологии-БАН, ул. „Акад. Георги Бончев“, бл. 1.

Материалите по защитата са на разположение на интересуващите се в канцеларията на Института за космически изследвания и технологии-БАН, ул. „Акад. Георги Бончев“, бл. 1.

### **Списък на често използвани в дисертацията съкращения:**

КЯ, QWs, QW – квантова яма, квантови ями  
ЕЩ, QCSE, SE - квантово-ограничен ефект на Щарк  
ОЩ, QCSS - квантово ограничено отместване на Щарк или само отместване на Щарк (Stark shift)  
CP, SL – свръхрешетки  
КЖ, QW - квантови жички  
КТ, QD - квантови точки  
ЗБ - зона на Брилуен  
ЗП - зоната на проводимост  
ЗЗ – забранена зона  
ВЗ – валентна зона  
ПКЯ, RQW – правоъгълна квантова яма  
ПарКЯ, PQW - параболична квантова яма  
ЦКЯ – цифрова квантова яма  
АКЯ – аналогова квантова яма  
МВЕ - молекулярно-лъчева епитаксия (molecular beam epitaxy)  
МОСVD - метало-органична епитаксия от газова фаза (химическата епитаксия от пари на метало-органични съединения - (metal-organic chemical vapor deposition  
F , EP - електрично поле  
ФЛ - фотолуминесценция  
GCQWs - КЯ с променлив химичен състав (Graded-concentration QWs), GGQWs - КЯ с променлива забранена зона, Graded-gap QWs).  
ТВ, ЕТВ - метода на силната връзка (tight-binding method), полуемпиричен метод на силната връзка  
ЕМА - Методът на ефективната маса (effective mass approximation)  
ЕФА - приближението на обвиващите функции (envelope function approximation)  
SGFM - метод на съшиване на Гриновите функции на повърхността, (surface Green function matching method)  
LDOS - локалната плътност на състоянията  
HEMT - транзистори с висока подвижност на електроните

### **Научно жури:**

#### **Вътрешни членове на НЖ:**

Проф. д-тн Георги Ставрев Сотиров - ИКИТ-БАН,  
Проф. д-фн Корнели Григориев Григоров – ИКИТ-БАН  
(Проф. д-тн Гаро Хугасов Мардиросян - резервен член).

#### **Външни членове на НЖ:**

Проф. д-фн Дориана Иванова Малиновска - ЦЛСЗНЕИ-БАН,  
Доц. д-р Зелма Моис Леви - ИФФТ-БАН,  
Доц. д-р Валерия Борисова Стоянова - ИФХ-БАН  
(Проф. д-р Евгения Димитрова Попова - ИМИ-БАН - резервен член),

## I. Увод

Полупроводниковите наноструктури и особено двойните хетероструктури, в това число полупроводниковите квантовите ями (КЯ, QWs), свръхрешетки (CP, SL), квантови жички (КЖ, QW) и квантови точки (QD) са предмет на интензивно изследване вече повече от две десетилетия [1]. Уникалните, принципно нови физични свойства на тези структури ги правят интересни с възможностите за нови фундаментални физични изследвания, както и с потенциалните им приложения в съвременното приборостроене за качествено нови електронни и оптоелектронни прибори с уникални свойства. Такива например са транзистори с висока подвижност на електроните с приложение и в сателитната телевизия, дълговълновите лазери, за съвременни телекомуникации на базата на оптични влакна, различни типове микрочипове, използвани в разнообразни устройства, вкл. в космическата индустрия. Например, слънчеви батерии на основата на хетероструктури  $AlGaAs$  се използват космическата станция "Мир" почти 15 години [1]. Лазери основани на двойна хетероструктура присъстват практически във всеки дом, а и в много от транспортните средства, под образа на CD и DVD устройства, лазерни принтери и т.н. Съвременното, а и бъдещото осветление, е на основата на светодиоди [1,9-11]).

Нанохетероструктури от материалите  $AlAs$ ,  $GaAs$  и  $Al_xGa_{1-x}As$ , са сред най-изучаваните поради добре отработените епитаксиални технологии за кристалното им израстване. Вече повече от 25 години се получават и изучават полупроводникови КЯ, включващи области с променлив химичен състав [19-35].

Предмет на тази дисертация е изследването на влиянието на постоянно външно електрично поле (т.н. квантово ограничен Щарк ефект, ЕЩ) върху електронните състояния и оптичните свойства на квантови  $AlAs/GaAs/AlGaAs$  ями с различен променлив химичен състав, представляващи практически интерес. Теоретични им разглеждания с реалистични модели на ЕЩ в тези системи са рядкост. Съществуващите в литературата пресмятания са направени с прости модели и не дават пълна представа за електронните състояния в КЯ с променлив химичен състав.

ЦЕЛТА на настоящата дисертация е да се направят числени пресмятания в рамките на реалистичен модел на силната връзка за електронните състояния в КЯ с постоянен и променлив химичен състав без и

при приложено постоянно електрично поле в направление перпендикулярно на интерфейса.

Поставени са за решаване следните конкретни **ЗАДАЧИ**:

1. Да се изготви програма (на Фортран) за пресмятане на плътностите на състоянията в квантови ями (КЯ) с произволен концентрационен профил без и с прилагане на постоянно електрично поле. За целта да се приложат метод на силната връзка, метод за съшиване на съответните функции на Грин на интерфейсите и приближение на виртуалния кристал.

2. Детайлно да се изучи ефектът на Щарк в базов модел на правоъгълни квантови ями (ПКЯ) с различни ширини и дълбочини.

3. Да се пресметне и анализира електронната структура в КЯ с параболичен (ПарКЯ) профил на концентрацията с различни ширини и дълбочини без и с приложено електрично поле.

4. Да се пресметне и анализира електронната структура на КЯ с дифузия на интерфейсите (ДКЯ) без и с приложено електрично поле.

5. Да се пресметне и анализира електронната структура в КЯ с “цифров” (ЦКЯ) и “аналогов” (АКЯ) профили на концентрацията без и с приложено електрично поле. Да се сравнени ефектът на Щарк при ЦКЯ и АКЯ.

6. Всички получени резултати за пресметнатите КЯ да се сравнят с тези на съответстващия им базов модел на ПКЯ, както и с налични данни от експерименти и други теоретични модели.

7. Да се проучат възможни приложения при прибори, работещи на базата на подобни КЯ.

## II. Обща част

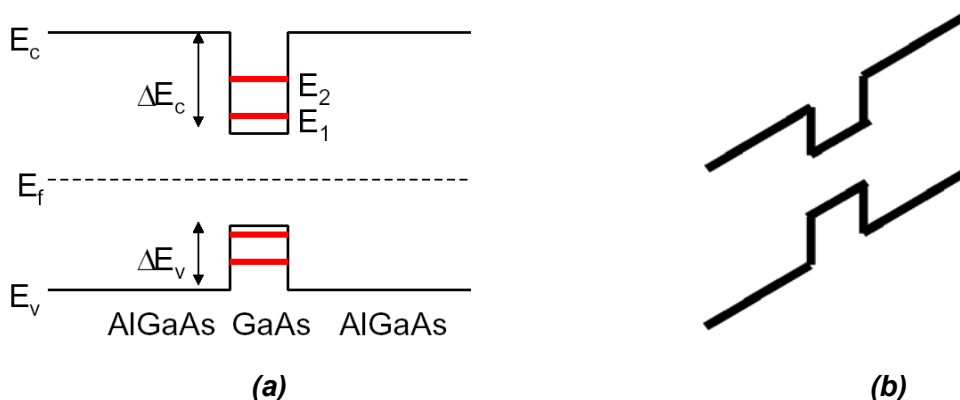
### 1. Квантово ограничен Щарк ефект (ЕЩ) в квантови ями

#### 1.1. Въведение

КЯ дължат специалните си свойства на квантовото ограничаване на носителите на заряд (електрони и дупки) в тънки слоеве от даден полупроводников материал (единична “яма”), който се намира между други два полупроводникови слоеве - “бариери”. Това ограничение формира дискретни нива на енергията в една КЯ, което определя различните ѝ електронни и оптични свойства спрямо обемния материал. Полупроводниковата КЯ се формира чрез създаване на хетеропреходи, т.е. при контакт на два различни полупроводника.

#### 1.2. Ефект на Щарк в квантови ями

Влиянието на външното постоянно електрично поле  $F$  върху енергетичните нива на електронния газ в полупроводниковите нанохетероструктури (като КЯ, СР, КЖ и КТ) се нарича *квантово-ограничен Щарк ефект* (ЕЩ, QCSE). При приложено външно постоянно  $F$  перпендикулярно на слоевете на КЯ (надлъжен ЕЩ), енергетичните електронни нива се отместват от положенията си, които имат без приложено  $F$ , и оптичните свойства на КЯ се променят. Приложеното  $F$  накланя зоните – получават се триъгълни КЯ (виж **Фиг. 5**). Енергията  $E_1$  на основното краево поглъщане (на основния оптичен преход) се отмества значително след прилагането на  $F$  (до  $E_2 < E_1$ ) без сериозно разширяване на линията на екситонните резонанси, т.е. енергията на прехода в КЯ намалява значително (червено отместване). Това отместване е известно като *отместване на Щарк* (ОЩ).



**Фиг. 5.** (a) Нива на енергиите в  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  КЯ без приложено електрично поле  $F$ ; (b) изкривяване на потенциала на КЯ (наклон на зоните) при приложено  $F$ .

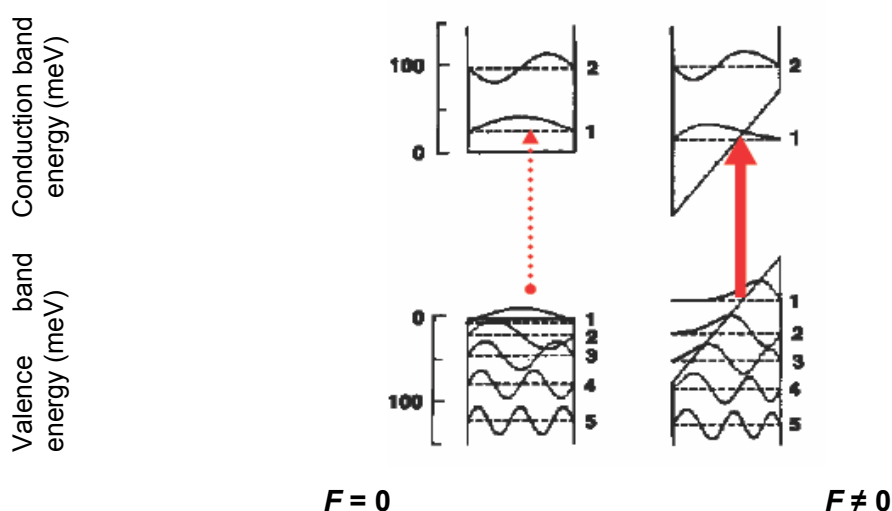
### 1.3. Експериментални изследвания на ефекта на Щарк

Експерименталните и теоретични изследвания на ЕЩ засягат както КЯ с постоянен, така и КЯ с променлив химичен състав. Някои от експерименталните техники, използвани за измерване на ЕЩ са: пикосекундна луминесценция в *AlGaAs/GaAs* КЯ. абсорбционно -токова спектроскопия; електроабсорбция; фотолуминисцентна спектроскопия; коефициент на електроотражение и разложена във времето фотолуминесценция; преходна спектроскопия на дълбоки нива и др.

### 1.4. Приборни приложения на ефекта на Щарк

ЕЩ се използва за направата на много и различни съвременни оптоелектронни устройства като: високоскоростни оптични модулатори, електро-оптични бистабилни устройства, инфрачервени детектори, вълноводи, най-различни оптични логични устройства, ултрабързи превключватели, соларни клетки, регулируеми полупроводникови лазери, SEED и други [2,3,5,7-17,60-71]. Ето накратко няколко конкретни примера.

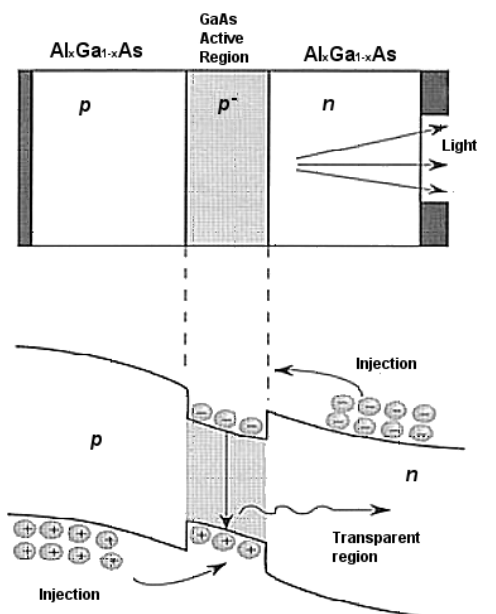
Принципът на оптична модулация, базирана на ЕЩ е следният. Работи се при енергия  $E_1$ , при която има силно поглъщане при приложено  $F \neq 0$ . При изключване на полето ( $F = 0$ ), екситонният пик в поглъщането се премества към по-високи енергии ( $E_2 > E_1$ ) и КЯ става прозрачна - приборът пропуска светлина в зависимост от приложеното напрежение. Обикновено са необходими мулти-КЯ за да се получи по-съществено поглъщане, съответно модулация на светлинния интензитет.



Фиг. 7. Отместване на Щарк (за енергетични зони и вълнови функции) в КЯ [63].

В [63] са описани модулатори, работещи на базата на ЕЩ. Намалването на енергията на свързаните състояния в КЯ при приложено  $F$  модулира "ефективната забранена зона", т.е. входният оптичен сигнал излиза модулиран. Промяната в енергийните нива дава промяна в припокриването на вълновите функции на електрони и дупки (**Фиг. 7**).

На **Фиг. 8** е представена схемата на светодиод на основата на двойна хетероструктура  $Al_xGa_{1-x}As / GaAs / Al_xGa_{1-x}As$  [58].



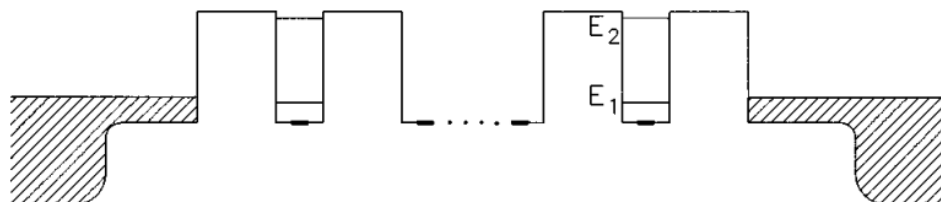
**Фиг. 8.** Схема на светодиод на основата на двойна хетероструктура  $Al_xGa_{1-x}As / GaAs / Al_xGa_{1-x}As$  [58].

Електроабсорбиращият модулатор (ЕАМ) [64] е полупроводниково устройство, което се използва широко в системите за комуникация с оптични влакна за модулиране на интензитета на лазерен лъч поради малкия им размер, ниското им напрежение (няколко волта вместо десетки), ниското задвижващо напрежение, ниско ниво на шум, висок коефициент на екстинкция, висока скорост (десетки GHz), висока ефективност на модулация и широка зона на пропускане на модулацията.

Инфрарчервените фотодетектори с квантова яма  $GaAs/AlGaAs$  (QWIPs) привличат голямо внимание и са продемонстрирали граница на детекция от 19  $\mu m$ . Тези детектори с по-дълги дължини на вълните биха представлявали интерес за **космически приложения** като *инфрарчервена астрономия и сателитно картографиране*, при които е важна висока чувствителност, нисък ток на тъмно (нощно виждане), висока еднородност, устойчивост на радиация и ниска консумация на енергия. За тези цели масиви от QWIPs са успешна алтернатива на наличните в този диапазон Si- и Ge-детектори.

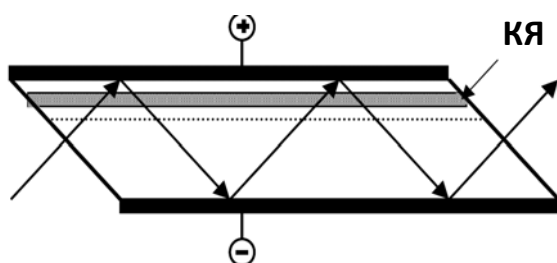


В [68] бяха представени първите резултати от далечно-инфрачервения анализ, основани на вътрешно зонни преходи от свързано към свързано състояние в инфрачервен фотодетектор на квантови ями GaAs/AlGaAs (GaAs/AlGaAs QWIP) с максимална чувствителност при 27.2  $\mu\text{m}$  (Фиг. 10).



**Фиг. 10.** Схема на инфрачервен фотодетектор, основан на вътрешнозонни преходи в квантови ями GaAs/AlGaAs. Наблюдаваният резонансен пик е при 27.2  $\mu\text{m}$ . Енергетическите зони са при  $E_1=10,5 \text{ meV}$  и  $E_2=53,5 \text{ meV}$  [68].

ЕЩ в единична КЯ [69] има не само научно-фундаментален, но и практически интерес, тъй като е възможно да се осигури оптичен модулатор на лазерна радиация върху структура от една КЯ (или малък брой КЯ) при многократно преминаване през него. На Фиг. 11 е показана структура върху подложка от *n*-GaAs, като плочата е скосена под 45 градуса по страничните ръбове. През една от тези страни лазерният лъч се въвежда и след множество отражения от успоредните горни и долни повърхности преминава през КЯ и излиза от другата страна. На горната повърхност с епитаксиална квантово-ямна хетероструктура се прилага изправящ контакт (например Al Шотки диод), а на долната страна - омичен контакт. Получат се около 20 преминавания на лъча през КЯ. За да се увеличи броя на преминавания на лъча през КЯ до 50, както е при модулаторите с много КЯ, или се увеличава дължината на модулатора, или се използва структура с две или три близко разположени КЯ.

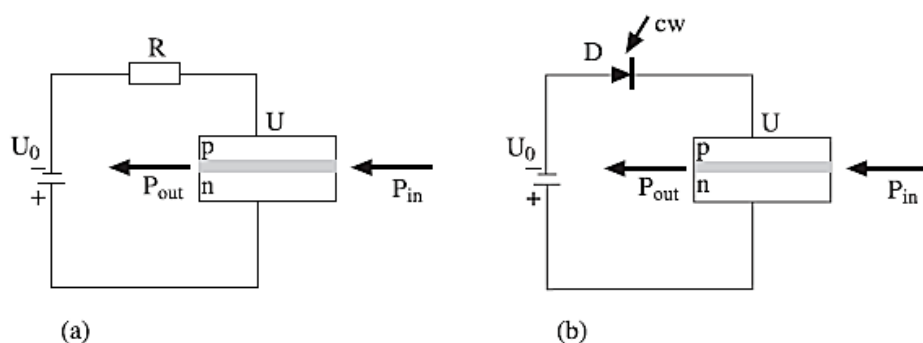


**Фиг. 11.** Оптичен модулатор на единична КЯ [69].

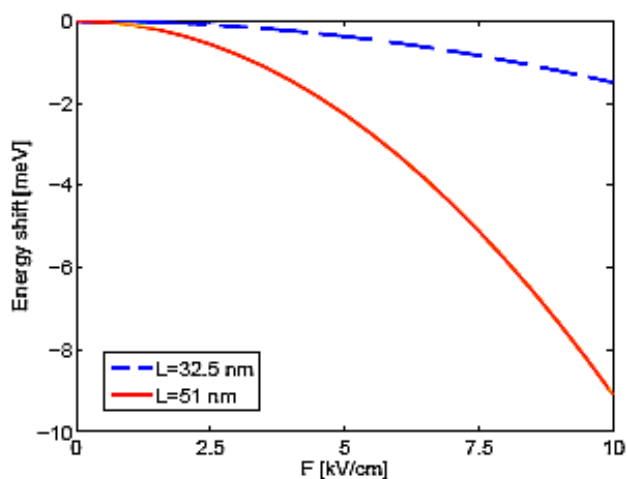
При приложено електрично поле коефициентът на абсорбция се намалява, абсорбционният край претърпява червено отместване и абсорбционният пик намалява значително. Този ефект се използва за оптични бистабилни устройства чрез свързване на КЯ във верига със съпротивление,

което осигурява обратна връзка на зависимата от полето абсорбция с пада на напрежение върху устройството [15]. Такива авто-електрооптични устройства (SEED) действат като бистабилни превключватели и оптични модулатори. За целта p-i-n структурата се свързва под постоянно обратно преднапрежение  $U_0$  с резистор R (R-SEED), **Фиг. 12 (a)**, или с фотодиод (D-SEED), **Фиг. 12(b)**.

Подобни експериментални и теоретични резултати за устройствата с КЯ с автоелектрооптичен ефект (SEED) са дадени и в [70]. Представени са четири режима на работа: оптична бистабилност; електрическа бистабилност; едновременно оптична и електронна самоосцилация и само-линеаризирана модулация и оптично преместване на нивото. Всички те могат да се наблюдават при стайна температура с лазерен диод с непрекъснато излъчване като светлинен източник.



**Фиг. 12.** Електрична верига с R-SEED (a) и D-SEED (b) [15].

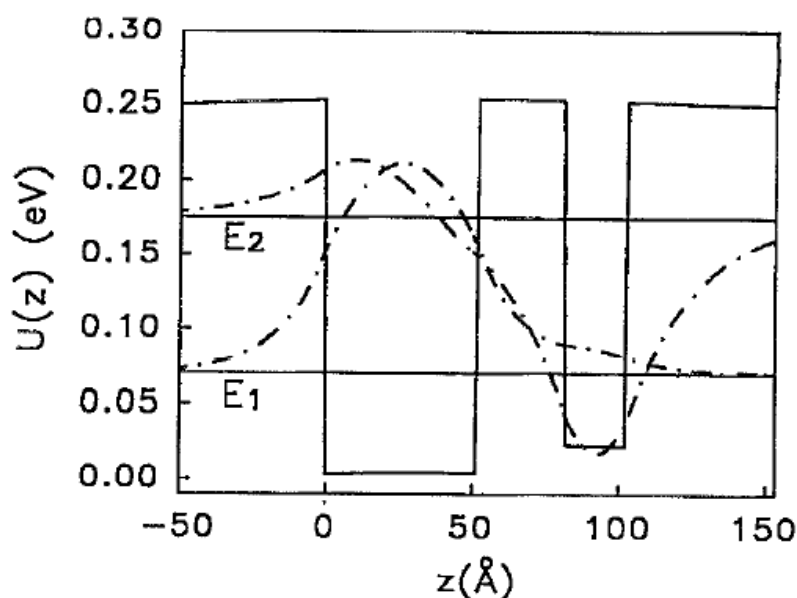


**Фиг.13.** Сравняване на отместването на Щарк за две широки ПарКЯ за най-ниския резонанс [89].

В [89] е представен метод за изследване на електрооптичните свойства на  $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$  широка ПарКЯ за случая на облъчване, успоредно на посоката на растеж. Получени са червени отмествания на абсорбционните

максимуми (ОЩ), асиметрични спрямо посоката на приложеното електрично поле ( $F \rightarrow -F$ ). Наблюдавана е зависимост на отместването на Щарк за различно широки ПарКЯ (**Фиг. 13**), респективно на абсорбционния спектър от размера на КЯ и посоката на приложеното поле.

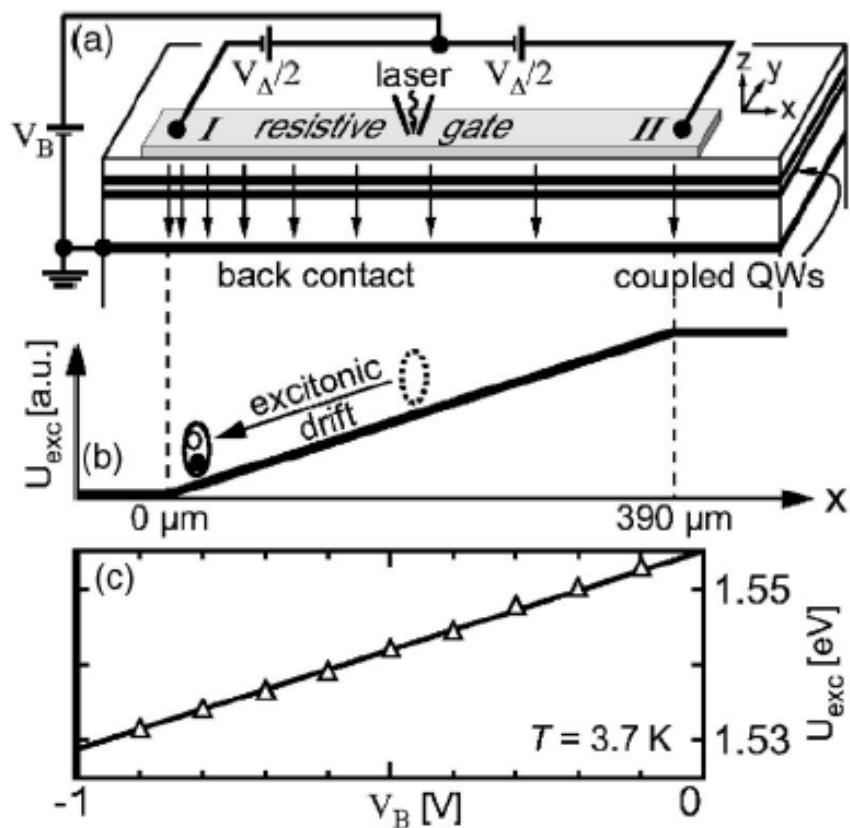
Предложен е фотодетектор за далечната инфрачервена област, работещ на базата на асиметрично свързани КЯ от GaAs, отделени от тънък бариер  $Al_xGa_{1-x}As$  (**Фиг. 14**). По този начин се постига силен регулируем ЕЩ. Областта на действие е от 8.2 до 11.3  $\mu m$  и от 7.8 до 10.5  $\mu m$ . Настройването се постига чрез вариране на приложеното електрично поле в диапазона от 20 до 90 kV/cm. Такива настройващи се фотодетектори са идеални за 8-12  $\mu m$  атмосферен спектрален прозорец. [90].



**Фиг. 14.** Схематична диаграма на асиметрично свързани КЯ с ширини 52 and 21 Å., ширина на бариера 30 Å и височина на бариера 250 meV [90].

Интересна възможност е предложена в [91] да се използва квантово ограничение Щарк ефект (ЕЩ) за изучаване на дрейфът на индиректни екситони в свързани GaAs КЯ в регулирани от напрежението полупроводникови устройства. Анализ на емитиращата фотолуминисценция на дрейфащите екситони позволява измерване на дрейфовата скорост и подвижността на екситоните. Наблюдавана е максимална подвижност  $105 \text{ cm}^2 / \text{eV s}$  при ниски температури, която е 200 пъти по-висока от преди получавани. За целта са израстнати  $AlGaAs/GaAs$  хетероструктури, съдържащи две GaAs КЯ с бариери от  $AlGaAs$  (**Фиг. 15**). Всяка КЯ е широка 8 nm, и те са разделени от 4-nm-бариер от  $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ . КЯ са локализирани на 60 nm под повърхността на

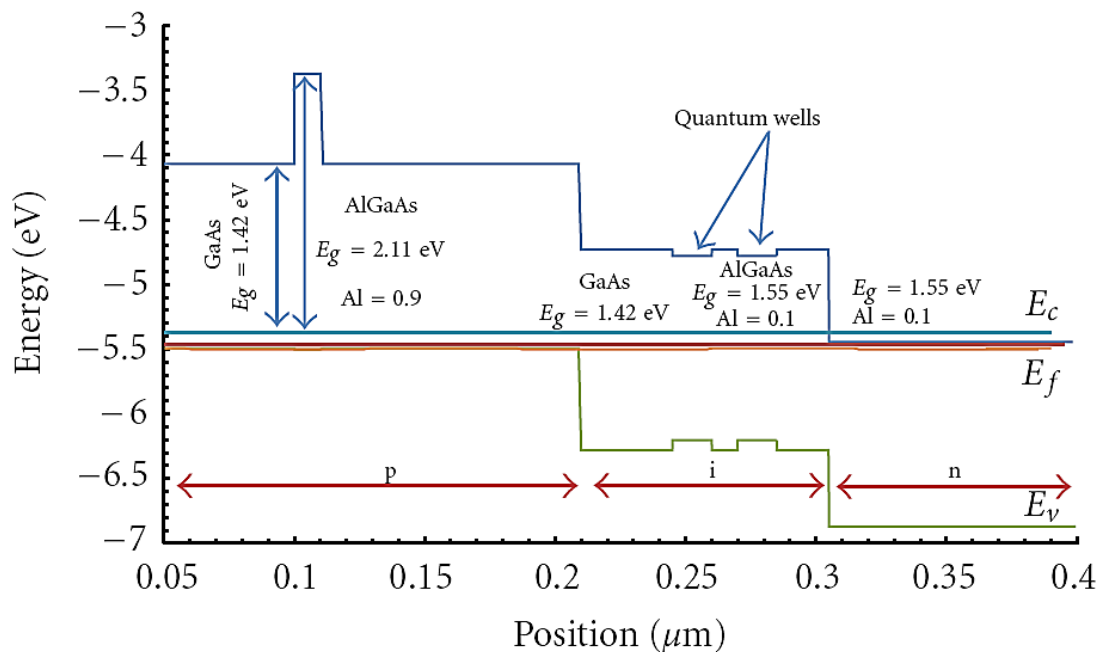
хетероструктурата. Избрана е дължина на лазера от 680 nm, така че двойките електрон-дупка да се създават само в GaAs КЯ, но не и в бариерите от AlGaAs.



**Фиг. 15 (a)** Апаратура. **(b)** Схема на екситонния потенциал между контакти I и II, дължащ се на ЕЩ (QCSE). Наклонът на градиента се регулира чрез напрежението  $V_{\Delta}$ . **(c)** Калибриране на QCSE отместването (ОЩ) чрез прилагане на правотоково напрежение  $V_B$  към горната плоча. [91]

Създаването на слънчеви клетки на базата на многоквантовата яма (multi-quantum well MQW) може след оптимизация да подобри тока и ефективността на преобразуване на мощност в сравнение с подобни клетки за конвенционална слънчева енергия, направени от обемен AlGaAs [92]. Предложеното устройство съдържа две 15 nm широки GaAs КЯ и 10nm широки Al<sub>0.9</sub>Ga<sub>0.1</sub>As бариери. Използвани са два, 20 nm широки емитиращ слой и 1000nm основен слой, а прозоречният слой е съставен от Al<sub>0.9</sub>Ga<sub>0.1</sub>As. Необходим е и покриващ слой заради високото съдържание на Al. **Фиг. 16** показва енергетичната диаграма на AlGaAs/GaAs MQW клетка без добавка на DBR (Distributed Bragg Reflector), който се поставя при задната повърхност. Структурата на DBR отразява частта на спектъра, който се ползва от абсорбцията в структурата на AlGaAs КЯ, като същевременно е прозрачна за инфрачервения спектър. DBR може да се използва като буфер за прикрепване

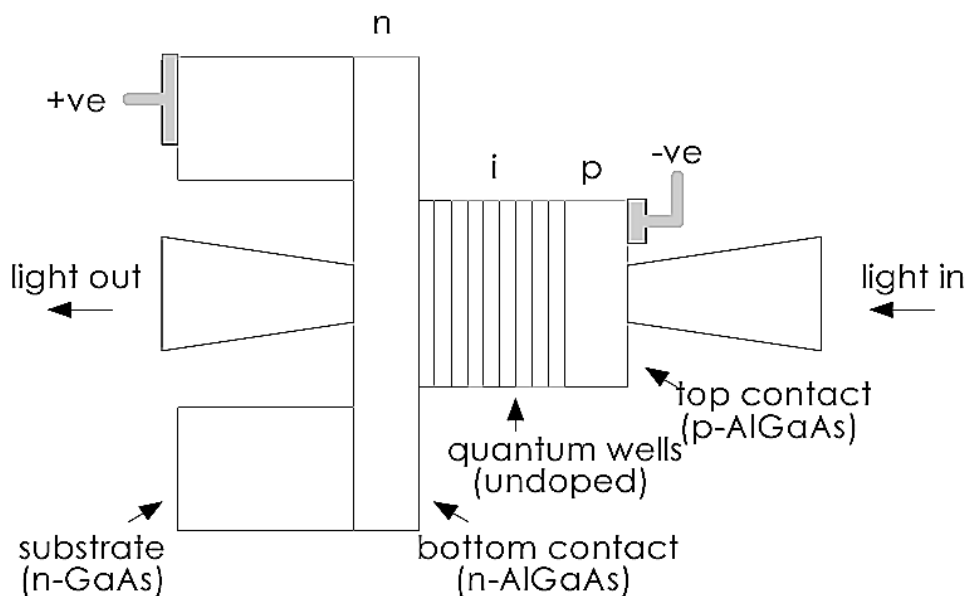
на втора клетка да абсорбира преминалите фотони за повишаване на ефективността.



**Фиг. 16.** Енергетична диаграма на оптимизирана слънчева клетка от мулти-КЯ [92].

Едни от често срещаните КЯ лазери (QWL) са изработвани от *GaAs* / *AlGaAs* структури, понеже *AlGaAs* QWL показват по-нисък праг на ток и по-висока диференциална квантова ефективност [93] в сравнение с редовния DHS лазер с двойна хетероструктура, предложен в 1998г. от Алферов [94] *GaAs/AlGaAs* КЯ лазери, работещи около 800nm днес са станали индустриален стандарт за приложения в локалните мрежи [95].

Упростена схема на оптичен модулатор, т.н. p-i-n диод, на базата на множество КЯ е показан на Фиг.17 [96]. Областта на ямите съдържа 50-100 КЯ от недотиран материал (*GaAs*) с дебелина 1-2  $\mu\text{m}$ . Съществено отместване на Щарк и изменения в абсорбционния спектър се получават при волтаж от 5 - 10 V. Областите "p" и "n" на диода са от материал (*AlGaAs*), който е максимално прозрачен за съответната дължина на вълната. Същият материал (*AlGaAs*) се използва за бариерите на КЯ. За случая на *GaAs/AlGaAs* КЯ, обичайният материал е *GaAs*, който е непрозрачен при най-често използваните дължини на вълните при тези модулатори, поради което подложката от *GaAs* трябва да се махне при трансмиссионния модулатор, като показания на **Фиг. 17**. Понеже диодите могат да бъдат миниатюрни, капацитетът им също може да е малък, затова тези устройства са особено подходящи за високоскоростни модулатори.



Фиг. 17. Структура на диод, конструиран на базата на квантови ями. [96]

В заключение, тъй като оптичните свойства на КЯ са забележителни близо до „optical band-gap energy”, то те позволяват създаването на редица устройства с нови възможности и практическа насоченост в оптоелектрониката. С развитието на физиката и технологиите ние можем да очакваме в бъдните години появата на напълно нови или подобрени варианти на сегашните устройства, което се изисква и от напредъкът на човечеството за овладяване на космоса.

## 2. Електронна структура на $A^3B^5$ полупроводници

### 2.1. Електронна структура на GaAs и AlAs

Полупроводниковите съединения  $A^{III}B^V$  (като GaAs и AlAs) имат кристална решетка тип сфалерит. Докато GaAs е полупроводник с пряка забранена зона (ЗЗ), то AlAs е полупроводник с непряка ЗЗ, Валентните зони на GaAs и AlAs имат същата структура.

### 2.2. Електронна структура на $Al_xGa_{1-x}As$ в приближение на виртуалния кристал

От гледна точка на електронната структура, тройните съединения (сплави), като  $Al_xGa_{1-x}As$ , не са кристали, понеже потенциалната енергия, действаща на електроните при движението им, няма трансляционна

симетрия [2]. Причината е случайното разпределение на атомите на *Al* и *Ga* в катионните възли на кристалната решетка. Обаче, в приближение на виртуалния кристал материалът се разглежда като кристално съединение, чиито параметри са линейна комбинация от параметрите на двата материала (*AlAs* и *GaAs*) [2, 89,90].

$Al_xGa_{1-x}As$  е прякозонен под критичната концентрация  $x_c = 0.43$ . Валентната зона на  $Al_xGa_{1-x}As$  има същите характеристики като тези на *AlAs* и *GaAs*. Константите на решетките на *AlAs* и *GaAs* са много близки (5.6605 Å и 5.6533 Å, съответно), затова константата на  $Al_xGa_{1-x}As$  практически не се променя с концентрацията. За ефективните маси на електроните и дупките линейната им комбинация дава добро приближение, а зависимостта на ширината на забранената зона ( $E_g$ ) може да се приеме за линейна под критичната концентрация ( $x < x_c$ ) [91]. В тази дисертация ние разглеждаме само случаи с  $x < x_c$ , т. е. с пряка зонна структура.

### **3. Електронна структура на $A^3B^5$ квантови ями**

Подобно на обемните материали, хетероструктурите се характеризират с определена ширина на забранената зона, с минимум на зоната на проводимост и максимум на валентната зона.

#### **3.1. Квантови ями с резки интерфейси**

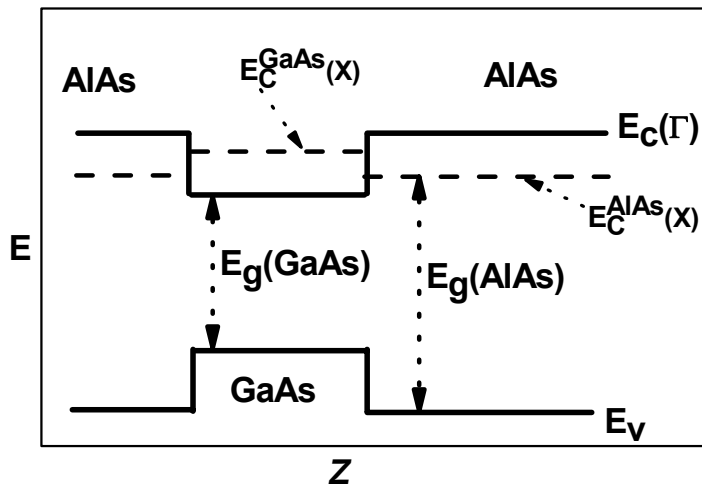
##### **3.1.1. Симетрия и първа зона на Брилуен за (001)**

##### ***AlGaAs/GaAs хетереструктури***

За структури без трансляционна периодичност по  $z$ , каквито са единичните КЯ,  $k_z$  вече не е добро квантово число и затова ЗБ на структурата *AlGaAs/GaAs* е двумерна.

##### **3.1.2. Зонна структура на *AlAs/GaAs* хетероинтерфейси**

Полупроводниковите хетероинтерфейси на *AlAs/GaAs* се характеризират с рязка прекъснатост в локалната зонна структура, поради различните ширини на забранената зона на двата материала (**Фиг. 23**).



**Фиг. 23.** Енергетичен профил на зоните на AlAs / GaAs / AlAs КЯ. Плътна линия – енергията на обемните  $\Gamma$ -минимуми; прекъснатата линия - обемните X-минимуми в зоната на проводимост ( $E_C^{GaAs}(X) > E_C^{AlAs}(\Gamma)$ ) [103].

Основни параметри, които определят електронните свойства на хетероструктурите, са прекъснатостите  $\Delta E_V$  на ВЗ и на ЗП -  $\Delta E_C$ , на съответните зони между двата материала в точката  $\Gamma$  или отношението между тях  $Q_c$

### 3.1.3. Единични AlGaAs/GaAs кватови ями

Поради ограниченото движение на носителите в КЯ, в нея възникват дискретни квази-двумерни (2D) подзони. В AlGaAs/GaAs КЯ подзоните на леките, на тежките дупки и на електроните са локализирани в GaAs.

## 3.2. Квантови ями с нерезки интерфейси

### 3.2.1. Качество на интерфейса

В моделните пресмятания на електронната структура в КЯ, обикновено се приема, че интерфейсите са идеално гладки. Реалните хетероструктури обаче не са идеални. В AlGaAs/GaAs КЯ с грапави интерфейси грапавостта на интерфейсите влияе върху елетронната им структура.

### 3.2.2. Интердифузия на интерфейса

Причина за нерезки интерфейси в хетероструктурите AlGaAs/GaAs е и дифузията на Al и Ga атоми в посока z, перпендикулярна на слоевете.

### 3.2.3. Дифузия в единични КЯ

Влиянието на дифузията върху електронните и оптични свойства на AlGaAs/GaAs нанохетероструктури е изследвано предимно за случаите на единична КЯ с правоъгълен начален концентрационен профил.



## **4. Теоретично описание на електронната структура на квантови ями, ТВ метод**

### **4.1. Електронна структура на кристали**

#### **4.1.1. Едноелектронно уравнение на Шрьодингер. Функции на Блох**

За намирането на стационарните електронни състояния на кристала използваме едноелектронното уравнение на Шрьодингер.

#### **4.1.2. Методи за описание на електронната структура**

За решаването му прилагаме полуемпиричния метод на силната връзка (ЕТВ, ТВ).

### **4.2. Полуемпиричен метод на силната връзка (ЕТВ), предимства, параметри**

#### **4.2.1. Представяне – основни принципи**

В ЕТВ метода хамилтонианът се представя в базис от едноелектронни вълнови функции на изолиран атом (атомни орбитали).

В този базис уравнението на Шрьодингер получава вида на уравнение за собствените стойности на матрицата на хамилтониана.

#### **4.2.3. ЕТВ модел $sp^3s^*$ с отчитане на спина и взаимодействия само между първи съседи за III-V полупроводници**

В тази работа се използва предложението от Vogl [138]  $sp^3s^*$  модел с отчитане на взаимодействие между първи съседи. Матрицата на хамилтониана за обемен материал в този базис е с размерност  $20 \times 20$  и зависи от 15 параметъра.

#### **4.2.4. Хамилтониан в смесено представяне. Пресмятане на хетероструктури**

При пресмятане на електронните свойства на КЯ не може да се използва хамилтониана за обемен материал, тъй като трансляционната симетрия на кристалната решетка вече е нарушена и вълновият вектор  $\mathbf{k}$  вече не е добро квантово число. Периодичността в равнината на словете ( $xy$ ) се запазва и полученият хамилтониан зависи от вълновия вектор  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  и от координатата  $z$  (респ. индекса на слоя  $n$ ).

В дискретен модел  $\Delta z$  има минимална стойност от един монослой. В направлението [001] в структурата на сфалерита един монослой съдържа два последователни атомни/моноатомни слоя, един от катиони и един от аниони. При отчитане на взаимодействия с първи съседи,  $sp^3s^*$  хамилтонианът е блочна тридиагонална матрица от вида (27) [28]. Всеки от елементите  $H_{m,n}$  на тази матрица е също матрица, съдържаща хамилтониана на взаимодействие между монослоеве с индекси  $m$  и  $n$ .

#### **4.2.5. Приближение на виртуалния кристал в ЕТВ**

Всички ЕТВ параметри от матриците  $H_{m,n}$  зависят от индексите на слоевете  $m$  и  $n$ . При пресмятане на хамилтониана на взаимодействие между два слоя с различна концентрация на  $Al$  се използва VCA.

#### **4.2.6. Ограничения и достойнства на ТВ метода**

Основен недостатък на ЕТВ метода е големият брой параметри необходими за точното възпроизвеждане на реалистичната зонна структура, което е ключов параметър за правилното описание на една наноструктура. Необходимо е тези параметри да бъдат определени чрез подходящо фитване/нагласяне на обемната зонна структура, получена от експериментарни данни или от други (по квантово механични, т.е. *ab initio*) методи [3]. Практика е ЕТВ параметрите да се избират така, че да дават най-добро съответствие с експерименталните данни за зонната структура в цялата ЗБ.

Моделът ТВ с  $sp^3s^*$  и първи съседи е най-широко използван в литературата и е доказал качествата си както за обемни, така и за хетеро- и наноструктури. За разлика от метода на ефективната маса и методът на обвиващата функция, ТВ методът е атомистичен метод, позволяващ разглеждане на реалната зонна структура в цялата зона на Брилуен и съответно получаване на детайли на атомно ниво. Не е маловажно, че ТВ методът не изисква използване на суперкомпютри (по това е сравним с метода на ефективната маса) и затова широко се използва за предсказване на структурни, оптични и електрични свойства на наноструктури. ТВ моделът позволява разрастване на възможностите му, чрез включване на  $d$ -орбитали [128,142], а също и по-далечни съседи – втори, трети. В комбинация с SGFM, метода ТВ позволява изследване на голямо разнообразие от нанохетероструктури.

## 5. Съшиване на функциите на Грин на интерфейсите или SGFM метод

### 5.1. Общи формули за съшиване

Методът на съшиване на функциите на Грин на интерфейсите или SGFM метод е подробно описан в [146] и в дисертацията. Тук се дават само някои резултати имащи отношение към КЯ.

Нека една система се състои от  $N$  подсистеми, всяка от които има своя Гринова функции и е дефинирана в съответната си област. Елементите на Гриновата функция на пълната система  $G_s$ , определена в цялото пространство се изразяват чрез Гриновите функции на подсистемите. Пълната Гринова функция на системата може да бъде получена само от проекцията  $\hat{u}$  на интерфейса  $\tilde{G}_s$ . Това е едно от основните предимства на SGFM метода.

### 5.2. Гринова функция, проектори и плътност на състоянията за дискретни среди

Пример за дискретна система е системата от електронни състояния на кристала в описанието на ТВ метода, която разгледахме. Хамилтонианът за тази система е блочна матрица с елементи  $H_{mn}$ , където  $m$  и  $n$  са дискретните стойности на координатата  $z$ . За тази система уравнението на Шрьодингер е:

$$H.A = E A, \quad (31)$$

За това уравнение Гриновата функция се дефинира като [146]

$$(E I - H).G(E) = I, \quad (32)$$

където  $I$  е единичната матрица.

Формулите за съшиване са валидни, при ограничен в пространството обхват на взаимодействията, за да може да се дефинира интерфейсната област, в която се прави съшиването. В ТВ  $sp^3s^*$  модела с взаимодействие само с първи съседи и направление на израстване на слоевете  $z$  [001], “основният слой” (в който става съшиването) отговаря на един монослой. Локалната плътност на състоянията  $N(E, n)$  за слой с индекс  $n$  се задава така

$$N(E, n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im tr } G_{nn}(E). \quad (35)$$

### 5.3. Съшиване на Гриновите функции за дискретни системи с $N$ интерфейса

Всяка от компонентите има обемна Гринова функция  $G_j$ . Целта е тези функции на Грин  $G_j$  да се съшият в компактна форма на  $N$  интерфейса, за да се получи и израза за функцията на Грин на цялата система  $G_s$  в термините на дадените  $G_j$ . Като изчислим  $\tilde{G}_s$  (пълната проекция на Гриновата функция на разглежданата дискретна система с  $N$  свързани и нееквивалентни интерфейса  $G_s$ ), можем да получим всеки елемент на  $\langle n | G_s | n' \rangle$  [148]

$$\tilde{G}_s^{-1} = EI - \sum_{j=1}^N \sum_{n_j \in (j)} \langle I | H | n_j \rangle \cdot \langle n_j | G_j | I_j \rangle \cdot \tilde{G}_j^{-1}. \quad (39)$$

Собствените стойности на хамилтониана се намират от

$$\det | \tilde{G}_s^{-1} | = 0, \quad (40)$$

а локалната плътност на състоянията се получава от (35).

### 5.4. Ограничения и достойнства на метода SGFM

В метода SGFM, при извеждане на общите формули за съшиване (37), както и на формулите за дискретна система (за непрекъснати системи извеждането е аналогично) с  $N$  интерфейса (38) и (39), не са правени никакви допълнителни приближения. Цялата грешка при пресмятане на енергиите идва от използвания физичен модел и от грешките при пресмятане на Гриновите функции на компонентите на системата. По принцип SGFM методът е изключително универсален и може да се прилага за различни задачи от типа (31) (т.е. пресмятане на електронна структура на твърди тела), стига да може да се направи съответен анализ за получаването на  $\tilde{G}_s$ .

При прилагане на SGFM метода към дискретни системи единственото ограничение е използваният физичен модел да позволява разглеждане и въвеждането на основен слой, т.е. ограничаване на обхвата на взаимодействията. Например, при пресмятане на зонни структури с ЕТВ методи, това условие е изпълнено, тъй като в тези модели винаги се отчитат взаимодействия само с ограничен брой по-близки съседи.

### III. Специална част

#### 6. Компютърни методи и алгоритми за пресмятане на електронната структура на КЯ с ТВ.

##### 6.1. Пресмятане на Гриновите функции

За пресмятане на Гриновата функция на съставна система с  $N$  интерфейса по метода SGFM е необходимо да се знаят Гриновите функции на компонентите на цялата системата. При разглеждане на КЯ  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  с резки интерфейси, тя се състои от хомогенни  $GaAs$  и  $Al_xGa_{1-x}As$  слоеве с различна концентрация  $x$  на  $Al$ . Тогава за намирането на Гриновата функция на всеки слой се използва алгоритъма на Lopez-Sancho [149,150] за безкрайна хомогенна среда (виж Приложение 3). При изследване на КЯ с нерезки интерфейси, се работи със слоеве с плавно променяща се концентрация. Тогава в рамките на SGFM метода всеки монослой се разглежда като отделна подсистема със собствена Гринова функция. Тогава се използва алгоритъма на Влаев и др. [28] за намиране Гриновата функция на крайна нехомогенна област. Разделяме системата на хомогенни и нехомогенни области и пресмятаме гриновите им функции.

##### 6.2. Параметри в ТВ метода

ТВ параметри за  $AlAs$  и  $GaAs$ , които използваме при пресмятанята са тези на Vogl и др. [138], с включване на спин-орбиталното взаимодействие.

##### ***Прекъснатости на зоните на хетеропреходите (band-offset параметър)***

Ние използваме експерименталната стойност 66/34 [21,152] за промяната на потенциала на интерфейса в центъра на зоната на Брилуен.

##### ***Параметри в метода на силната връзка (ТВ) в плочи (области) с променлив състав***

ТВ параметрите на трикомпонентна плоска структура  $A_{x(z)}B_{1-x(z)}C$  в направление  $z$ , се получават от тези на двойните сплави  $A_{x(z)}C$  и  $B_{1-x(z)}C$  по метода на виртуалния кристал.

##### ***ТВ параметри в крайни плочи при приложено постоянно електрично поле***

Влиянието на електричното поле е взето предвид чрез промяна само на диагоналните ТВ параметри в матрицата на хамилтониана.

## 7. Ефект на Щарк (ЕЩ) в правоъгълни квантови ями (ПКЯ)

### 7.2. Пресмятане на ЕЩ в правоъгълни квантови ями (ПКЯ) с различни ширини

Разглеждаме влиянието на постоянното електрично поле  $F$  върху електронните състояния в ПКЯ, пресметнати с ТВ метод [37]. *Не ни е известно в литературата изчисляването на ЕЩ да е правено преди публикуване на нашите резултати за ПКЯ с този метод [37].* А изследването с ТВ метод на тези системи може да осигури нова информация за отместванията на Щарк и интензитетите на преход. Моделът на ТВ отчита реалната кристална структура на тримерното твърдо тяло, наличието на много зони и съответното им смесване заедно с периодичността в равнината на структурата на КЯ. Проблемът на ТВ параметрите в присъствието на постоянно електрично поле е решен в по-общия случай на електромагнитно поле [131]. Резултатът за ТВ параметризацията в [131] оправдава интуитивния избор на ТВ параметрите в [28] и дава нови възможности пред полуемпиричните ТВ изчисления на сложни хетероструктури в присъствието на електрически полета.

Изследваните ПКЯ са с постоянен химичен състав от  $GaAs$  с три различни ширини, а именно  $N = 11, 22$  и  $44$  ML. (Един ML (монослой) се равнява на два атомни слоя и  $1ML = 2.825 \times 10^{-10} m = 0.2825 nm = 2.825 \text{ \AA}$  за направлението на кристален растеж [001].) Такава ПКЯ може схематично да се види на **Фиг. 2 - Фиг. 6**. Концентрацията  $x$  на  $Al$  в бариерите  $Al_xGa_{1-x}As$  е постоянна,  $x=0.36$ . Ние изчисляваме енергиите на свързаните състояния на електроните, свързаните състояния на дупките и техните пространствени разпределения без и при прилагането на постоянно електрично поле ( $F$ ). То се прилага паралелно на оста  $z$  на кристален растеж в направление [001], т.е. перпендикулярно на интерфейса. Изчисляваме също и енергиите на основните оптични преходи  $E(C1-NH1)$ ,  $E(C1-LH1)$ ,  $E(C2-NH2)$  и техните отмествания на Щарк (ОЩ).

Числените пресмятания са направени чрез метода на съшиване на повърхностните Гринови функции (SGFM) и необходимите матрици на Гриновите функции се оценяват с помощта на алгоритъма, даден в [28, тук т.6.1., ПЗ]. Ние използваме приближението на полуемпиричния метод на силната връзка (ЕТВ) в спиново зависим  $sp^3s^*$  базис, както е описано в [28,37, и тук в т.4.2.3.], за да намерим Гриновите функции. Определяме присъствието на външното статично електрично поле  $F$  чрез добавяне на линейно променящ се с разстоянието член  $\Delta_n$  само към диагоналните елементи на матрицата на ТВ

Хамилтониана:  $TB(n, x) = TB(x) + \Delta_n$ ,  $\Delta_n = (n-1) \cdot F \cdot \frac{a}{4}$ , където  $a$  е константата на решетката,  $F$  - напрегнатост на надлъжното постоянно електрично поле,  $TB(x)$  - диагоналните  $TB$  параметри без електрично поле за обемен материал с концентрация  $x$  на  $Al$ ,  $n$  е номерът на слоя в КЯ. Тази промяна се дължи на линейната зависимост от потенциала на електричното поле. Катионът е в позиция  $n=1$ . Концентрацията на  $Al$   $x$  е постоянна във всеки слой, но е функция от  $n$ . Една от целите на изчисленията беше да се проверят резултатите, които тази параметризация дава. Определяме  $TB$  параметрите  $TB(x)$  на сплавта  $Al_xGa_{1-x}As$  от приближението на виртуалния кристал:  $TB(x) = x \cdot TB(AlAs) + (1-x) \cdot TB(GaAs)$ . По принцип навсякъде в КЯ с променлив състав  $x$  е  $x(n)$ . Но при ПКЯ  $x$  е константа и в ямата и в бариерите. Прилагаме метода на Гриновите функции за съшиване на повърхности, за да се изчисли Green функцията на безкрайна система, съдържаща ограничена /крайна/ нехомогенна плоча [28]. Всички изчисления се извършват в рамките на спин-зависим  $sp^3s^*$   $TB$  модел [97,138], и "band-offset" равен на 66/34 [152]. Влиянието на електричното поле е взето предвид чрез промяна само на диагоналните  $TB$  параметри, (виж стр. 62).

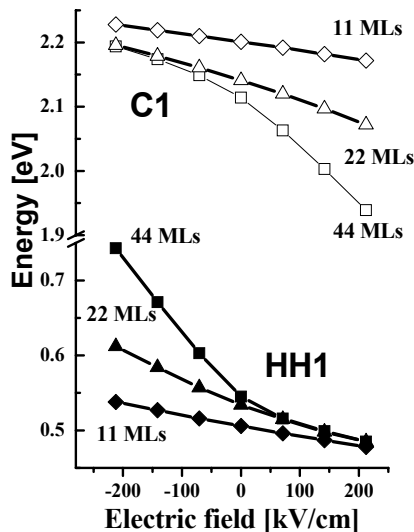
Ние намираме енергийните позиции на квази-свързаните електронни състояния от максимумите на проектираната плътност на състоянията. Една крайна имагинерна част се прибавя към енергията, за да се разширят в компютъра делта пиковете, свързани с основните състояния, която е в интервала от 0.01 до 0.0001 eV. Локалната плътност на състоянията в слой  $n$ , се изчислява въз основа на добре познатата формула

$$-\frac{1}{\pi} \text{ImTr}G(n, n; E) \quad (41)$$

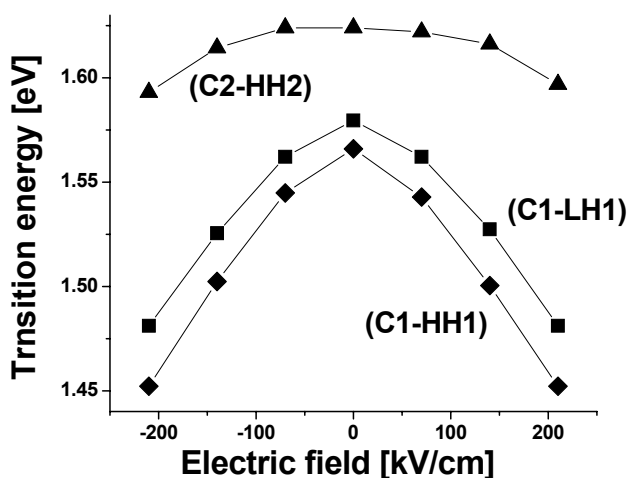
Електричното поле прилагаме между двете страни (двата края) на КЯ. В нашия теоретичен модел, полето се прилага към *крайна плоча*, т.е. областта, където се намира КЯ ( $GaAs$ ). Извън областта на КЯ, са разположени безкрайни хомогенни бариери ( $Al_{0.36}Ga_{0.64}As$ ) с крайни височини, където  $F$  е нула за трите КЯ. Ние се уверихме, като проверихме, че енергиите на основните оптични преходи ( $C1-NH1$ ) и ( $C1-LH1$ ) са едни и същи за различни размери на тази плоча (КЯ). По този начин, ние се спряхме на плоча, включваща нашите КЯ и е достатъчно да се приложи полето само в края на КЯ [164].  $F$  е положително,

когато придвижва надолу дясната страна на ръба на зоната на проводимост. Нашите числени пресмятания покриват широка гама от електрически полета  $F$ , от -200 до +200 кВ/см. Всички изчисления се извършват в центъра на двумерната зона на Брилюен. Нулата на енергията е фиксирана на върха на валентната зона на  $AlAs$  в точка Гама. Пресмятанията са направени за температура  $T = 0K$ .

**Фиг. 27** показва изчислените енергии за първите свързани състояния на електроните  $C1$  в зоната на проводимост и първите свързани състояния на тежките дупки  $HH1$  във валентната зона в трите КЯ в зависимост от приложеното  $F$ . Забелязахме, че ефектите на електричното поле зависят съществено от ширината на КЯ, т.е. при една и съща стойност на  $F$ , отместванията на Щарк се увеличават с увеличаването на ширината на КЯ.



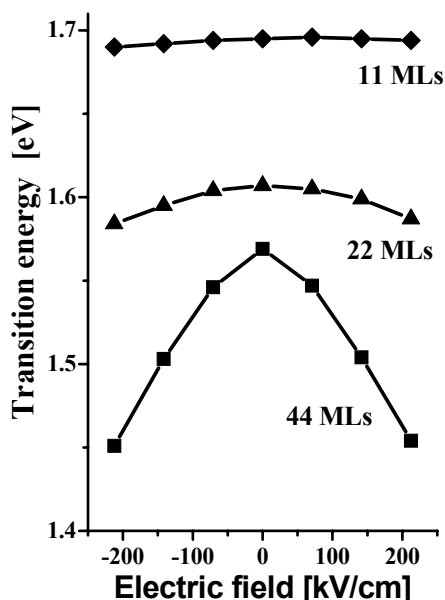
**Фиг. 27.** Изчислените енергии на свързаните състояния на електроните в зоната на проводимост  $C1$  (празни символи), свързаните състояния на дупките във валентната зона  $HH1$  (запълнени символи) в трите КЯ в зависимост от приложеното постоянно електрично поле. 11 ML – ромбове, 22 ML – триъгълници, 44 ML – квадрати.



**Фиг. 28.** Зависимост на енергиите на основните оптични преходи от приложеното  $F$  за КЯ с ширина 44 ML (равна на 12.452nm).  $E(C1-HH1)$  - ромбове;  $E(C1-LH1)$  - квадрати;  $E(C2-HH2)$  - триъгълници.

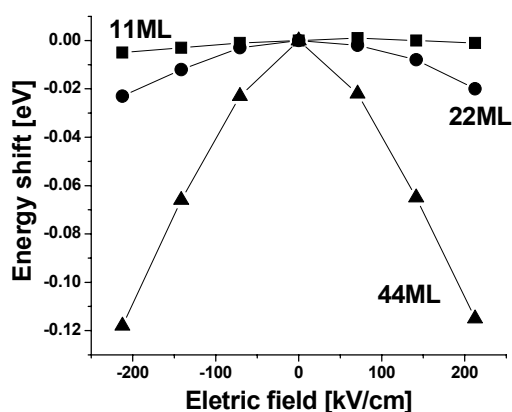


**Фиг. 28** показва зависимостта на пресметнатите енергии на основните оптични преходи,  $E(C1-HH1)$ ,  $E(C1-LH1)$  и  $E(C2-HH2)$ , от приложеното  $F$  за ПКЯ с ширина 44 ML. Енергиите на преход намаляват с нарастването на  $F$ .  $E(C2-HH2)$  е най-малко повлияна от полето в сравнение с другите две енергии.



**Фиг. 29.** Зависимост на енергията на основния оптичен преход  $E(C1-HH1)$  от приложеното електрично поле  $F$  за трите КЯ.

**Фиг. 29** показва зависимостта на енергията на основния оптичен преход  $E(C1-HH1)$  от електричното поле за трите КЯ. Тук наблюдаваме подобна зависимост: при по-широка КЯ е по-силно влияние на електричното поле. С повишаване на прилаганото електрично поле, енергията на преход намалява.



**Фиг. 30.** Отместванията на Щарк (ОЩ) за основния преход  $E(C1-HH1)$  за трите, с различна ширина, разглеждани ПКЯ в зависимост от величината на приложеното  $F$ .

**Фиг. 30** показва зависимостта на пресметнатите ОЩ за основния преход  $E(C1-HH1)$  за трите разглеждани ПКЯ в зависимост от  $F$ . ОЩ за дадена величина е разликата в стойностите на тази величина при  $F \neq 0$  и при  $F = 0$ . И тук както и при другите зависимости, се вижда че при по-широка КЯ е по-силно

влияние на  $F$ . Всички криви са симетрични по отношение на нулата на  $F$ . С повишаване на интензивността на прилаганото  $F$ , нараства ОЩ (по абсолютна стойност). Зависимостите на отместванията от ефективната маса, електричното поле и ширината на КЯ проявяват поведението, описано в [51].

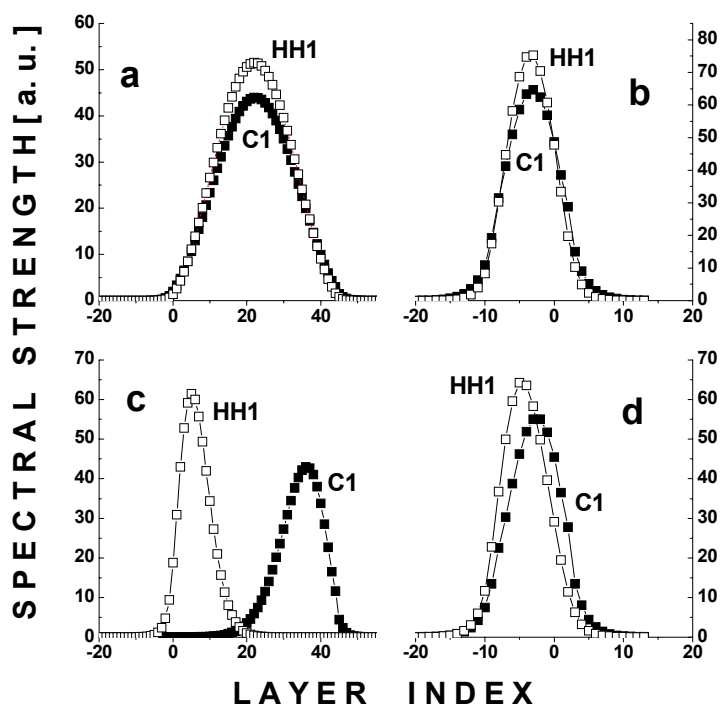
Резултатите за вероятностните пространствени разпределения на общата спектрална сила за основното електронно ( $C1$ ) и първото на тежките дупки ( $HH1$ ) свързани състояния в ПКЯ с ширини 11, 22 и 44 ML са показани на **Фиг. 31**. Пространствените разпределения на нивата  $C1$  (запълнени квадрати) и  $HH1$  (празни квадрати) са показани за две стойности на електричното поле  $F$ , 0 kV/cm (**Фиг. 31(a)** и **Фиг. 31(b)**) и 212.4 kV/cm (**Фиг. 31(c)** и **Фиг. 31(d)**), и за две КЯ с ширини от 11 ML (**Фиг. 31(b)**, **Фиг. 31(d)**) и 44 ML (**Фиг. 31a**, **Фиг. 31c**). За двете КЯ има пълно припокриване на пространствените разпределения при  $F = 0$ . Изместване на пространствените разпределения  $C1$  и  $HH1$  се появява при електрично поле  $F \neq 0$ . Това изместване е по-голямо при по-широка ПКЯ. За КЯ с ширина от 44 ML е достигната **критичната стойност на електричното поле (Фиг. 31(c))**.

При критичната стойност на полето, интензивността на оптичния преход клони към нула, поради липсата на пространствено припокриване между състоянията  $C1$  и  $HH1$ . По този начин, интензитетът на ( $C1-HH1$ ) прехода ще изчезне за тази яма. На **Фиг. 31d** виждаме, че КЯ с ширина 11 MLs е далеч от критичната стойност на полето. Същият преход за същото електрично поле ще има ненулев интензитет в ПКЯ с 11 ML, поради значителното пространствено припокриване между основните състояния (виж **Фиг. 31d**). По този начин, може да бъде получена критичната стойност на електричното поле за даден оптичен преход, при което имаме нулево пространствено припокриване.

Трябва да се отбележи, че стойностите на критичното поле са много важен показател за даден преход. Те дават максималната стойност на електричното поле, до която даден оптичен преход на КЯ може да намери приборно приложение. От **Фиг.31** става ясно, че ПКЯ с ширина 11 монослоя, не е подходяща за прибори, защото пространствените й разпределения (за  $C1$  и  $HH1$ ) почти не се отместват при прилагане на електричното поле. Същевременно, преходът ( $C1-HH1$ ) в ПКЯ с ширина 44 монослоя би бил подходящ за прибори, работещи до  $\sim 200$  kV/cm.

Сравнението на нашите изчисления с експерименталните данни и други изчисления за КЯ с подобни параметри са представени в *Табл. 2*. Налице е

добро съответствие между изчислените от нас стойности и експерименталните данни (виж Табл. 2). Несъответствията е естествено да произтичат от някои различия в нашите и на другите автори параметри на изследваните КЯ (ширини, концентрационни профили), неотчетени температурни и екситонни ефекти, както и други неточности при преизчисляване на данни от наличните в публикациите графики или дори от недотам точно експериментално измерване на полето. Затова можем да считаме, че съответствието между теория и експеримент в този случай е напълно задоволително.



**Фиг. 31.** Пространствени разпределения на общата спектрална сила на нивата *C1* (пълните квадрати) и *HH1* (празни квадрати) за две стойности на електричното поле  $F$ ,  $0 \text{ V/m}$  (*a* и *b*) и  $212.4 \text{ kV/cm}$  (*c* и *d*), и за две КЯ с ширини от  $11 \text{ ML}$  (*b* и *d*) и  $44 \text{ ML}$  (*a* и *c*).

**Таблица 2.** Сравнение на нашите изчисления с експерименталните данни и други изчисления от литературата за ОЩ на  $E(C1-HH1)$  за ПКЯ с подобни параметри.

$F$ [ kV/cm ]	Отмествания на Щарк за $E(C1-HH1)$ , [ meV ]										
	Дисертация			[39]		[40]		[41]	[42]	[43]	[44]
70	1	2	24	0	6	0	7.1	20	10	7.36	8.09
140	0	8	67	2	20	0	18.75				
Ширина на КЯ в ML	11	22	44	17.70	35.40	17.70	35.40	4602	35.40	36.11	35.40
$\chi$ (A/ конц. в бариери)	0.36			0.30		0.30		0.35	0.6	1	0.6

**Извод:** За първи път (с ТВ метода) са проведени реалистични числени пресмятания на свързаните електронни състояния, свързаните дупчести състояния и техните пространствени разпределения без и с прилагане на различни стойности на надлъжното електрично поле  $F$  за ПКЯ с различни ширини. Резултатите, които сме получили показват, че алгоритъмът [28], с приложената параметризация за наличие на постоянно електрично поле, работи много добре на практика и дава разумни резултати за ПКЯ. Това дава нови възможности пред полуемпиричните ТВ изчисления на сложни хетероструктури в присъствието на електрически полета.

Получени са ОЩ в ПКЯ с три ширини 11, 22 и 44 монослоя. Влиянието на полето е по-силно при по-широки ями.

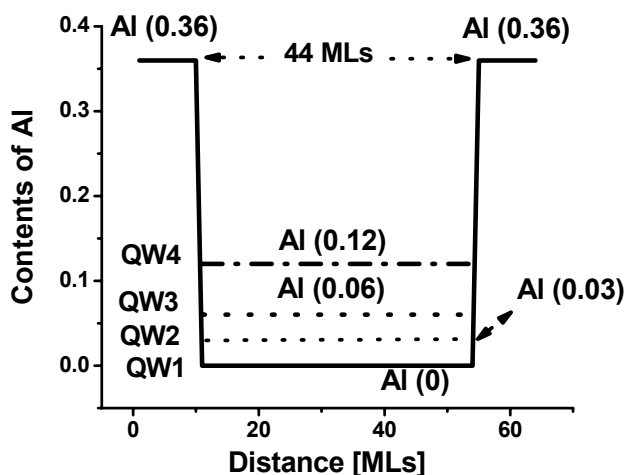
Получени са стойностите на критичното поле, за които интензитетите на основните оптични преходи в изследваните ПКЯ рязко отслабват. Най-широката от изследваните тук ПКЯ се оказва най-подходяща за приборни приложения, при работа на основния оптичен преход до  $\sim 200$  kV/cm.

### 7.3. Ефект на Щарк в ПКЯ с различни дълбочини

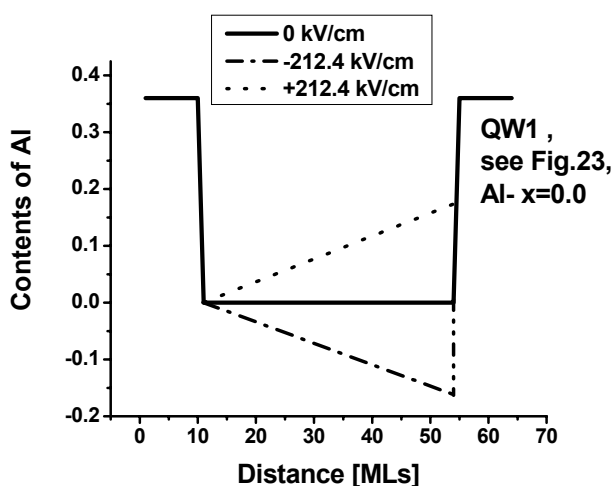
Тук са показани някои резултати на пресметнати правоъгълни квантови ями от типа  $Al_xGa_{1-x}As$  с различни дълбочини без и в присъствието на постоянно  $F$  перпендикулярно на интерфейса. Представени са някои от получените в [173] резултати. Пресмятането е извършено аналогично по схемата описана в т. 7.2. Тук КЯ са с еднаква ширина, от 44 MLs, но са с различни дълбочини. КЯ се формират в системата  $Al_yGa_{1-y}As/Al_xGa_{1-x}As/Al_yGa_{1-y}As$ . Концентрацията на Al у във всички бариери  $Al_yGa_{1-y}As$  е постоянна  $y=0.36$  и е еднаква за всеки разглеждани ПКЯ. Концентрацията на Al x в областта на КЯ  $Al_xGa_{1-x}As$  е постоянна, но е различна за различните КЯ и приема четири различни стойности:  $x = 0$ ,  $x = 0.03$ ;  $x = 0.06$ ;  $x = 0.12$ ; съответно за четирите изследвани ПКЯ (виж **Фиг. 32**).

На **Фиг. 33**, виждаме влиянието на  $F$  върху профила на концентрацията на една от ПКЯ. Електричното поле прави концентрационния профил наклонен. Посоката на наклона на този профил зависи от посоката и стойността на приложеното  $F$ . Електронният концентрационен профил  $E_C(x(z))$ , т.е. ръбът на зоната на проводимост, на тези КЯ има същата форма като концентрационния им профил. Той по същия начин променя формата си при приложено  $F$ . Поради линейната зависимост на края на зоната на проводимост и на валентната зона

от концентрацията на  $Al$   $x$ , ограничаващия потенциал за електрони и дупки се подчинява на същата зависимост, т.е. той е същият като концентрационния профил [33].



**Фиг. 32.** Схема на концентрационни профили на четири ПКЯ без приложено  $F$ . Първата ПКЯ (QW1) е под номер 1 и се състои от чист GaAs. Втората КЯ2 има концентрация на  $Al$   $x = 0.03$ , третата КЯ3  $x = 0.06$  и четвъртата КЯ4  $x = 0.12$ . Концентрация на  $Al$   $x = 0.36$  е съставът на всички бариери.

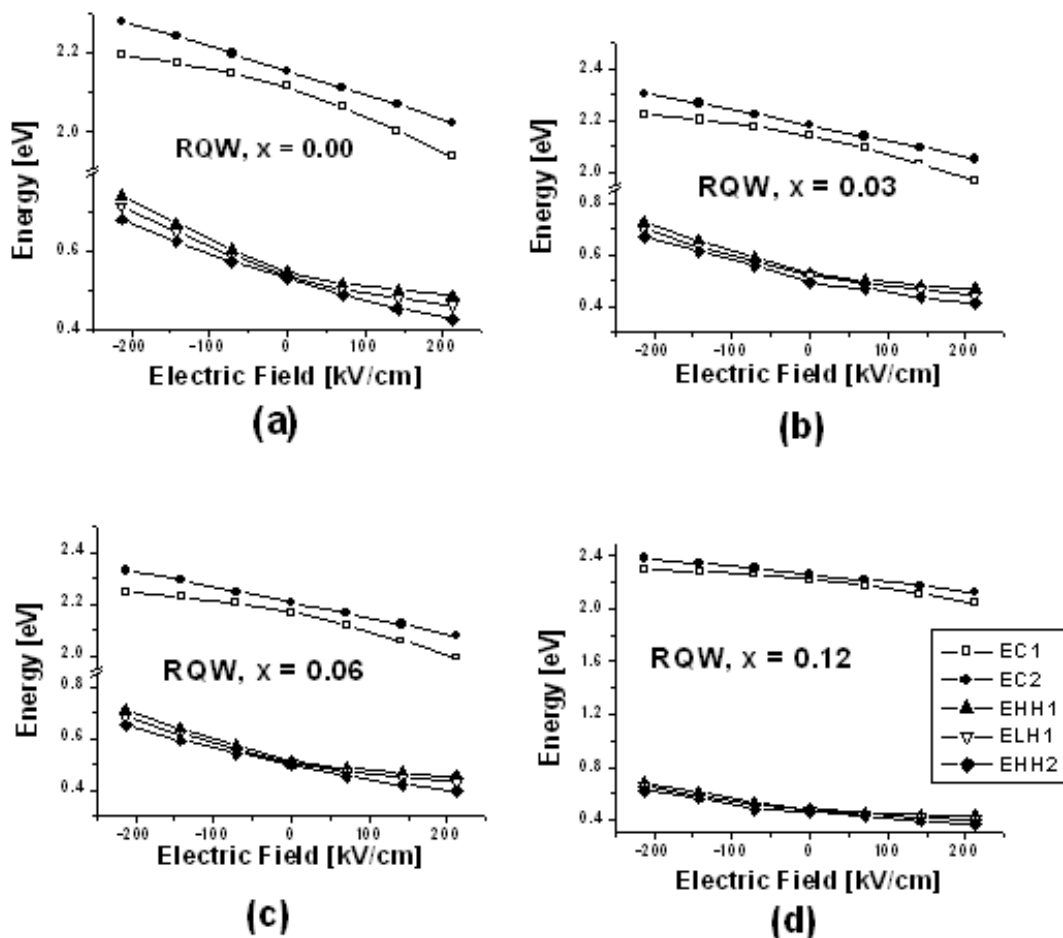


**Фиг. 33.** Схема на концентрационен профил на една от ПКЯ (КЯ1) без и с приложено  $F = 212.4$  kV/cm. (виж КЯ QW1 от Фиг. 32).

**Фиг. 34** показва изчислените енергии за  $EC1$  и  $EC2$  (енергиите на основните свързани състояния в проводимата зона) и за  $E_{HH1}$ ,  $ELH1$  и  $E_{HH2}$  (енергиите за основните свързани състояния във валентната зона) за нашите четири ПКЯ. Поведението на енергиите е сходно: те намаляват или нарастват с увеличаването или намаляването на приложеното  $F$ . Концентрацията  $x$  на  $Al$  за всяка ПКЯ е показана на фигурата.

**Фиг. 35** показва енергиите на основния преход  $E(C1-HH1)$ . Както виждаме,  $E(C1-HH1)$  са по-големи за КЯ с по-голямо съдържание на  $Al$  (или по-плитки). С увеличаване на концентрацията на  $Al$  в КЯ енергията на прехода

$E(C1-HH1)$  се увеличава. А за всички КЯ енергиите на основния преход намаляват с увеличаване на приложеното електрично поле.

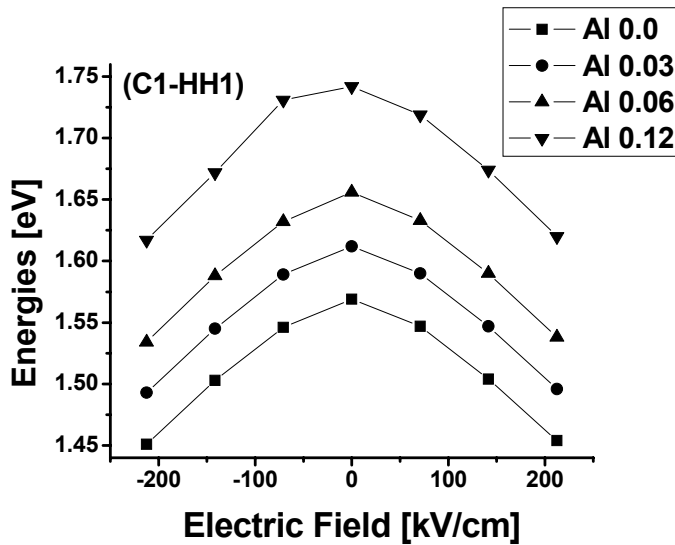


**Фиг. 34.** Основните изчислени енергии на свързаните електронни и дупчести състояния за ПКЯ без и с прилагане на постоянно  $F$ . Концентрацията на Al  $x$  за всяка от четирите ПКЯ е показана на фигурата.

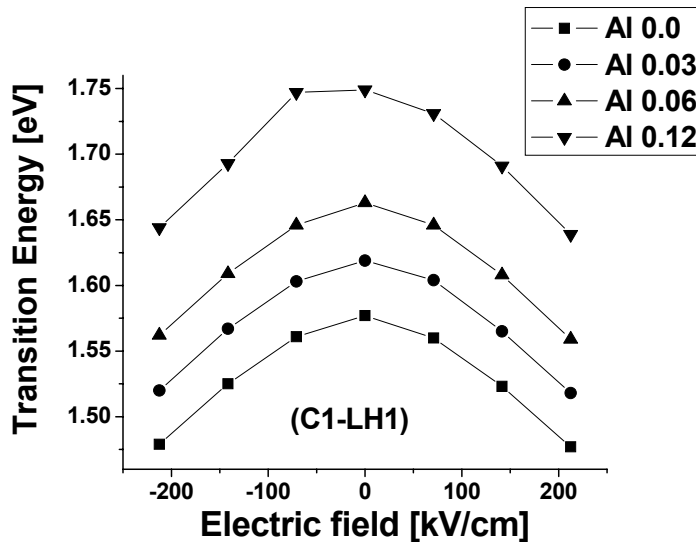
**Фиг. 36** показва енергиите на прехода  $E(C1-LH1)$  като функция на приложеното  $F$ . Както виждаме,  $E(C1-LH1)$  са по-големи за КЯ с по-голямо съдържание на Al (или по-плитки). С увеличаване на концентрацията на Al в КЯ енергията на прехода  $E(C1-LH1)$  се увеличава.

**Фиг. 37** показва енергиите на прехода  $E(C1-C2)$  за четирите КЯ. Те са по-големи за КЯ с по-ниско съдържание на Al (или по-плитки). С увеличаване на концентрацията на Al в КЯ енергията на прехода  $E(C1-C2)$  намалява. За всички КЯ енергиите на междузонните преходи ( $E(C1-HH1)$  и  $E(C1-LH1)$ ) намаляват с увеличаване на приложеното електрично поле. Само енергията на вътрешнозонния преход  $E(C1-C2)$  и за четирите КЯ нараства с увеличаване на приложеното електрично поле. При едно също приложено  $F$ , енергията на вътрешнозонния преход  $E(C1-C2)$  е най-ниска за КЯ с най-голямо съдържание на Al (най-плитки КЯ). Следователно, можем да кажем, че увеличението на

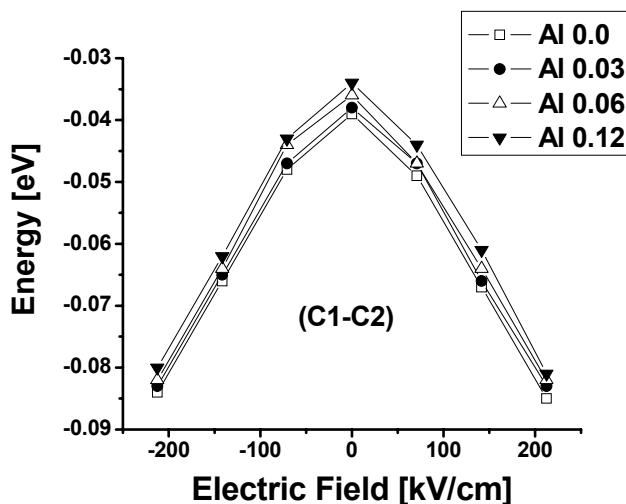
концентрацията на  $Al$  (или намаляването на дълбочината на КЯ) в ПКЯ дава по-добри промени на ЕЩ (енергиите на преходите намаляват при приложено  $F$ ) при прилагане на едни и същи стойности на електричното поле за енергиите на междузонните преходи ( $E(C1-HH1)$  и  $E(C1-LH1)$ ). Само енергията на вътрешнозонния преход  $E(C1-C2)$  и за четирите КЯ, независимо от концентрацията на  $Al$ , не показва добри промени за ЕЩ (енергията нараства при прилагани на  $F$ ).



**Фиг. 35.** Енергиите на основния преход  $E(C1-HH1)$  като функция на приложеното  $F$  за ПКЯ, които са означени със състава си на  $Al$ .

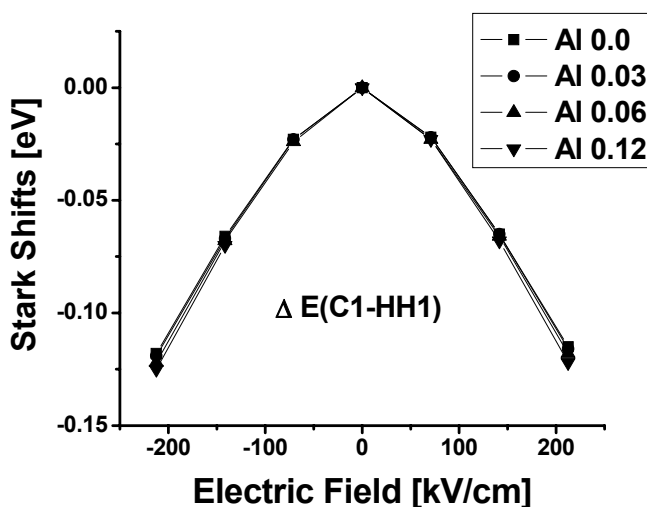


**Фиг. 36.** Енергиите на прехода  $E(C1-LH1)$  като функция на приложеното  $F$  за ПКЯ, които са означени според състава си на  $Al$ .



**Фиг. 37.** Енергиите на прехода  $E(C1-C2)$  като функция на приложеното  $F$  за ПКЯ, които са означени според състава си на  $Al$ .

**Фиг. 38.** показва отместванията на Щарк (ОЩ) за основния оптичен преход  $E(C1-HH1)$  за четирите, с различна дълбочина, разглеждани ПКЯ в зависимост от величината на приложеното  $F$ . Ясно е, че ОЩ са, макар и малко, по-големи за ПКЯ с по-голямо съдържание на  $Al$ . С увеличаване на концентрацията на  $Al$  в КЯ ОЩ на енергията  $E(C1-HH1)$  нарастват, за полета по-големи от 140 kV/cm. За четирите ПКЯ, ОЩ за енергиите на прехода  $E(C1-HH1)$  нарастват с нарастването на прилаганото електрично поле. Следователно, ние можем да кажем, че увеличаването на концентрацията на  $Al$  в ПКЯ (или с други думи по-плитките ПКЯ) дава по-добри, макар и не големи, (особено при ниски стойности на  $F$ ) промени за ефекта на Щарк за основния оптичен преход при прилагане на едни и същи стойности. на електрично поле.



**Фиг. 38.** Отместванията на Щарк (ОЩ) за основния оптичен преход  $E(C1-HH1)$  за четирите разглеждани ПКЯ с различна дълбочина в зависимост от величината на  $F$ . ПКЯ са показани на фигурата чрез състава си, т.е. съдържанието на  $Al$  в тях.



**Извод:** Проведени са реалистични числени ТВ пресмятания на свързаните електронни състояния и свързаните дупчести състояния без и с прилагане на различни стойности на постоянно надлъжно  $F$  за четири типа ПКЯ с различна дълбочина. Можем да кажем, че увеличението на концентрацията на  $Al$  (при по плитки ями) в ПКЯ дава не големи, но по-добри промени на ЕЩ за междузонните преходи при прилагане на едни и същи стойности на електричното поле.

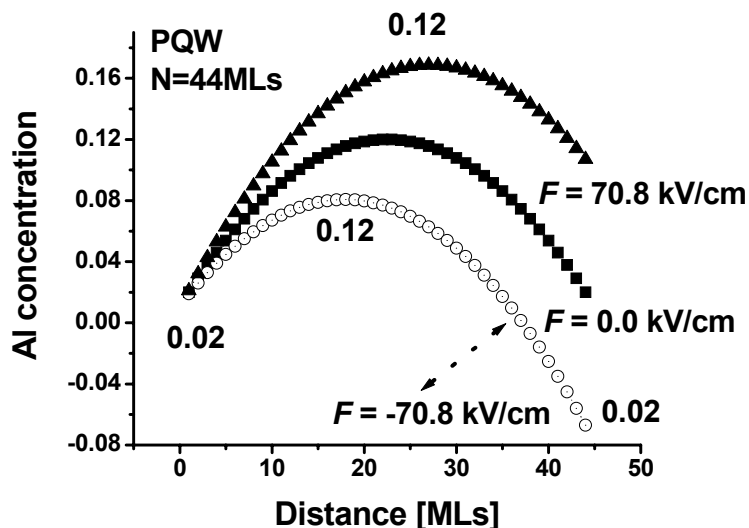
Можем да кажем, че ЕЩ в КЯ с постоянен химичен състав (т.е. ПКЯ) се влияе както от ширината, така и от дълбочината на ПКЯ. От сравняването на ОЩ за основния преход  $E(C1-НН1)$  в двата разгледани вида ПКЯ (различни ширини и дълбочини) правим заключението, че ОЩ при еднаква стойност на приложеното  $F$  се повлияват много по-силно от ширината на КЯ отколкото от дълбочината ѝ. В случая, по отношение на ефекта на Щарк, ширината на КЯ се оказва много по-силен фактор от дълбочината на КЯ.

## **8.1. Квантови ями с параболичен концентрационен профил**

### **8.1.1. ЕЩ в единична параболична квантова яма (ПарКЯ)**

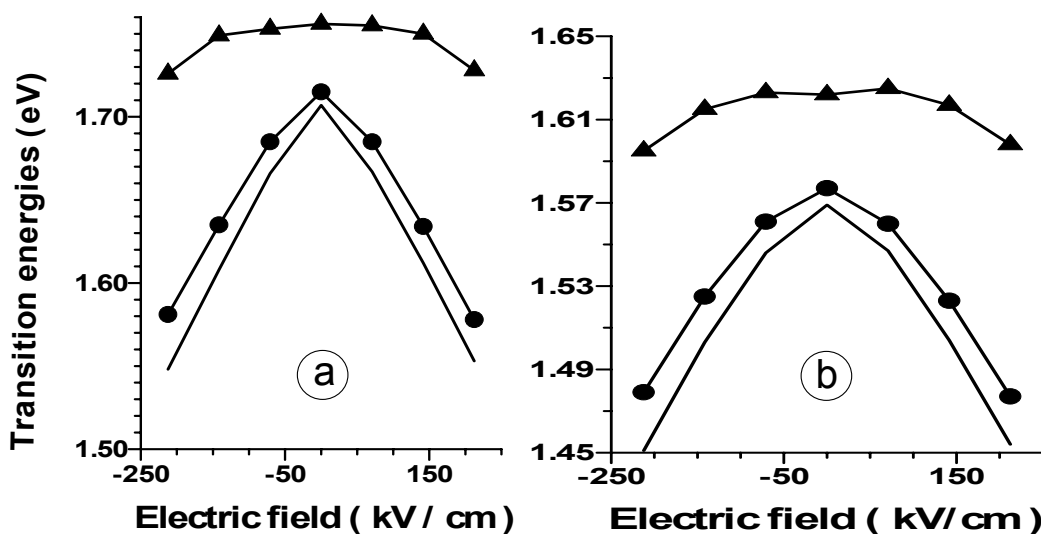
В [38,47] сме направили реалистични изчисления по метода на силната връзка (tight-binding method = TB) на надлъжния ефект Щарк (Stark effect = SE) в параболична КЯ (ПарКЯ) и за сравнение и в правоъгълна квантова яма (ПКЯ). КЯ са  $Al_xGa_{1-x}As$  с правоъгълни и параболични концентрационни профили, и постоянното електрично поле е приложено перпендикулярно на интерфейсите. Пресмятанията извършваме с ТВ в спиново зависим  $sp^3s^*$  базис, същия приложен и в т.7, но сега и за КЯ с променлив химичен състав. Този алгоритъм прави възможно прилагането на метода SGFM [146] за съшиване на крайна нехомогенна област (КЯ) с две полубезкрайни хомогенни области (бариери). И тук, както и за ПКЯ (т. 7), описваме приложеното  $F$  перпендикулярно на интерфейсите с изместване на диагоналните членове на емпиричната ТВ Хамилтонова матрица със съответния потенциален пад  $\Delta$  (в meV/meV) през един монослой. Електричното поле  $F = 70.8$  kV/cm съответства на  $\Delta = 1$  meV. Полето се прилага между първия ( $n = 1$ ) и последния ( $n = N$ ) монослой (ML). Катионът е в положение  $n = 1$ . В бариерните области електричното поле е  $F = 0$ . Ширината на двете КЯ еднаква и е 12,43 nm или  $N = 44$  ML. Посоката на растеж е [001]. Концентрацията на  $Al$   $x$  в бариерите е  $x = 0.36$ . Т.е. всички бариери са полубезкрайни и със състав  $Al_{0.36}Ga_{0.64}As$ . В правоъгълната КЯ  $x$  е

равно на  $x = 0$ . В параболичната КЯ (ПарКЯ, PQW)  $x$  варира параболично от 0.02 при бариерите (в левия и десен край на ямата) до 0.12 в средата на КЯ (виж **Фиг. 39**).



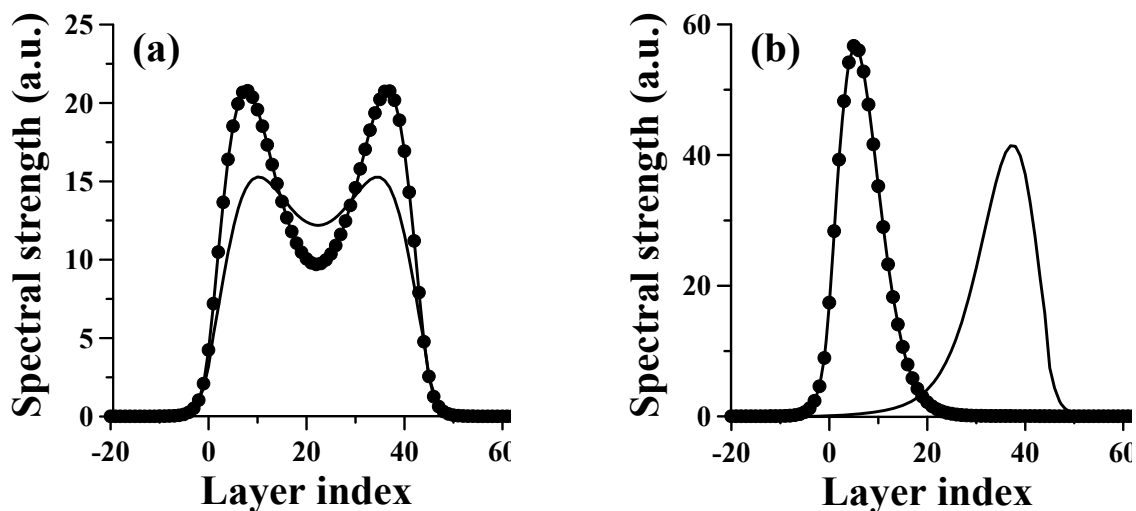
**Фиг. 39.** Схема на една от пресметнатите параболични квантови ями (ПарКЯ). Показани са профила на съдържанието на Al, който съвпада с потенциалния енергетичен профил на квантовата яма, при три стойности на приложеното електрично поле.  $F$ : 70.8 kV/cm; 0.0 kV/cm и  $-70.8$  kV/cm

**Фиг. 40** показва изчислените основни енергии на оптичен преход  $E(C1-HH1)$ ,  $E(C1-LH1)$ ,  $E(C2-HH2)$  без и в присъствие на постоянно електрично поле за ПарКЯ (a) и ПКЯ (b). За двете КЯ енергиите на преход намаляват с увеличаване на приложеното електрично поле. Те са по-големи в ПарКЯ, отколкото в ПКЯ при прилагане на едно и също електрично поле.

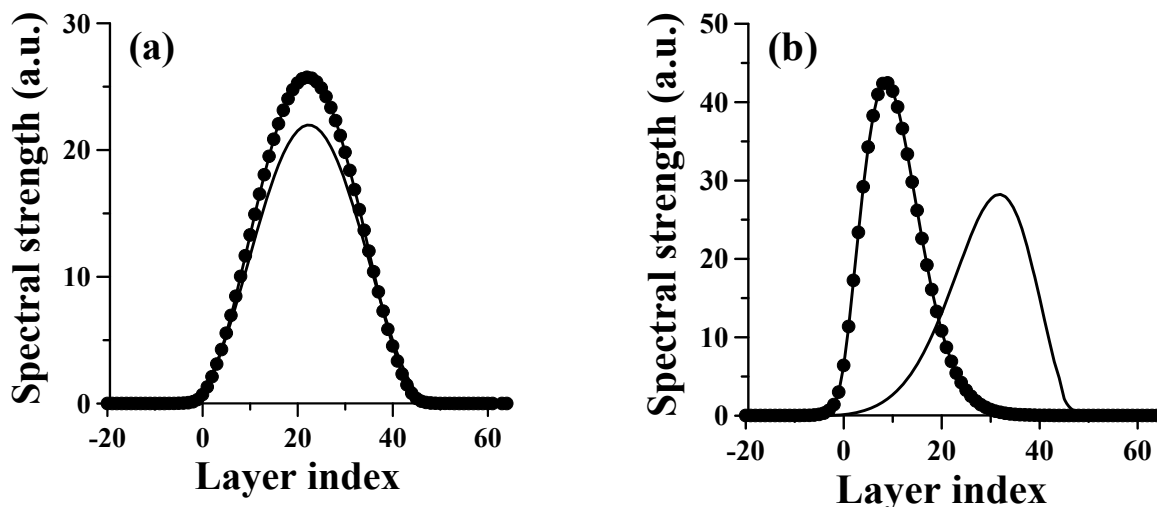


**Фиг. 40.** Енергиите на преход като функция от приложеното електрично поле за (a) ПарКЯ и (b) ПКЯ.  $E(C1-HH1)$  - плътна линия;  $E(C1-LH1)$  - линия с кръгове;  $E(C2-HH2)$  - линия с триъгълници.

**Фиг. 41** и **Фиг. 42** показват пространствените разпределения на общата спектрална сила за свързаните състояния в зоната на проводимост  $EC1$  и във валентната зона  $EHH1$  без (a) и в присъствието (b) на постоянно електрично поле.



**Фиг. 41.** Спектрална сила за ПарКЯ, (a) с  $F = 0$ , (b) с  $F = 70.8$  kV/cm,  $EC1$  (линия),  $EHH1$  (кръгове).



**Фиг. 42.** Спектрална сила за ПКЯ, (a) с  $F = 0$ , (b) с  $F = 70.8$  kV/cm,  $EC1$  (линия),  $EHH1$  (кръгове).

Полето показано на **Фиг. 41b** и **Фиг. 42b** е  $F = 70,8$  kV/cm. При  $F$  равно на нула разпределенията са симетрични за двата вида КЯ. И двете разпределения за  $EC1$  и  $EHH1$  имат изместени амплитуди в една и съща посока в присъствието на това приложено електрично поле, но изместването за параболичната КЯ (ПарКЯ) е по-голямо, отколкото за правоъгълната КЯ (ПКЯ), което е резултат от концентрационния профил. Освен това за ПарКЯ се вижда от **Фиг. 41b**, че е почти достигната стойността на критичното поле, докато ПКЯ

(*Фиг. 42b*) при това поле е още далече от критичната стойност. Наличните експериментални данни [40,83,88] са в задоволително съгласие с изчисленията. Например за ПарКЯ ние получаваме за  $E(C1-HH1)$  стойността от 1.601 eV. В [88] за същите условия (77K), но за КЯ с  $N=46ML$  експерименталните резултати са 1,65 eV за аналоговите и 1,617 eV за цифровите ПарКЯ. За  $E(C1-HH1)$  в ПКЯ при  $F = 70.8$  kV/cm нашите резултати са 1.527 eV (77K) и 1.538 eV (8K). Експерименталните данни за ПКЯ са: 1.435 eV (77K, КЯ е с ширина от 10.8 nm) [83]; 1.542eV (8K, 10 nm) [40]; 1.538 eV / cm [8K, 12 nm] [40].

**Извод:** Получените тук резултати показват, че енергийните нива в ПарКЯ са по-чувствителни към приложеното електричното поле, отколкото в ПКЯ (т.е. отместванията на Щарк са по-големи за ПарКЯ отколкото за ПКЯ при еднаква стойност на  $F$  и еднаква ширина на КЯ). Критичната стойност на  $F$  за ПарКЯ е по-ниска отколкото тази за ПКЯ.

Следователно ПарКЯ е по-подходяща за приборни приложения базирани на ЕЩ и работещи при полета по-слаби от критичното поле  $F$  (т.е. по-малки от  $\sim 70kV/cm$ ) отколкото ПКЯ.

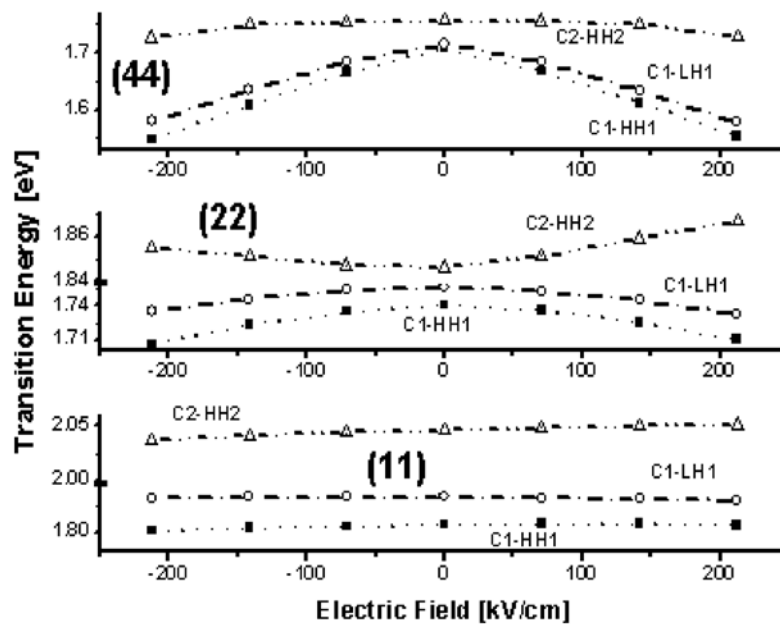
Получените тук резултати показват, че енергийните нива в ПарКЯ са по-чувствителни към приложеното електричното поле, отколкото в ПКЯ (т.е. отместванията на Щарк са по-големи за ПарКЯ отколкото за ПКЯ при еднаква стойност на  $F$ ). Критичната стойност на  $F$  за ПарКЯ е по-ниска отколкото тази за ПКЯ.

### **8.1.2. ЕЩ в квантови ями с параболичен концентрационен профил (ПарКЯ) с различни ширини**

В [174] сме направили реалистични изчисления по метода на силната връзка (ТВ) на надлъжния ефект Щарк (ЕЩ) в параболични КЯ (ПарКЯ) с три различни ширини. КЯ са  $Al_xGa_{1-x}As$  с параболични концентрационни профили, и постоянното електрично поле е приложено перпендикулярно на интерфейсите. Пресмятанията извършваме с ТВ в спиново зависим  $sp^3s^*$  базис, същия приложен и в т.8.1.1., но сега за КЯ с различни ширини. В бариерните области електричното поле е отново  $F = 0$ . Ширините на трите КЯ са 11, 22 и 44 ML. Посоката на растеж е [001]. Концентрацията на Al  $x$  в бариерите е  $x = 0.36$ . Т.е. всички бариери са полубезкрайни и със състав  $Al_{0.36}Ga_{0.64}As$ . В параболичните КЯ (ПарКЯ, PQW)  $x$  варира параболично от 0.02 при бариерите (в левия и десен край на ямата) до 0.12 в средата на КЯ (виж *Фиг. 39*).  $F$  се прилага от

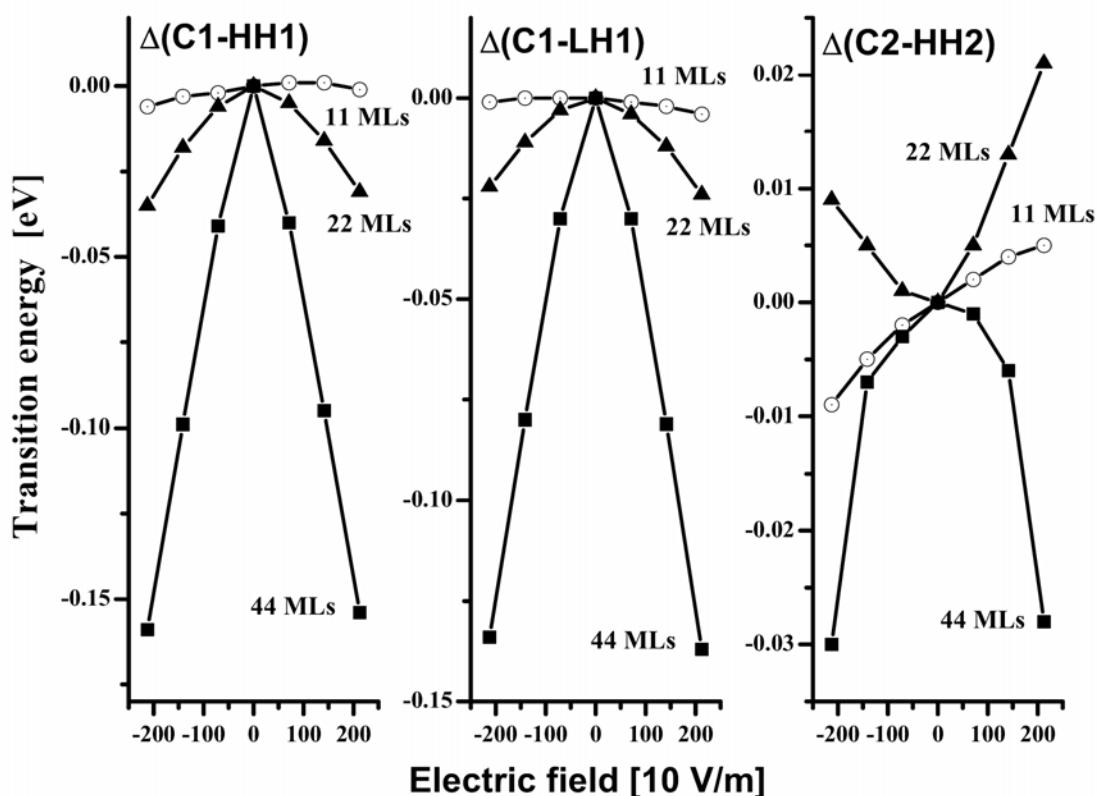
двете страни на ПарКЯ. Полето  $F$  е положително ако придвижва надолу дясната страна на края на зоната на проводимост. Изчислените енергии включват екситонни и температурни ефекти [175] в сравнение с експерименталните данни.

**Фиг. 43** показва изчислените основни оптични енергии на преход  $E(C1-HH1)$ ,  $E(C1-LH1)$  и  $E(C2-HH2)$  без и в присъствието на постоянно електрично поле  $F$  за параболичните КЯ. За трите КЯ енергиите на преход намаляват с увеличаване на приложеното електрично поле. Енергиите на преход са по-големи в ПарКЯ (PQW) с по-голяма ширина, отколкото в ПарКЯ с по-малки ширини, при прилагане на същото електрично поле. Забелязваме, че ефектът на електричното поле значително зависи от ширината на ямата: при еднаква стойност на  $F$ , ОЩ (отместването на Щарк) нараства с увеличаване на ширината на КЯ. Забелязваме също, че зависимостта от  $F$  е по-голяма за  $(C1-HH1)$  и за  $(C1-LH1)$ , отколкото за  $(C2-HH2)$  енергиите на преход. Преходът  $(C2-HH2)$  показва особености за по-тесните ями. Той дава синьо отместване. Сравнението с изчисленията, получени от нас по-рано [37] за правоъгълни КЯ, показва същата зависимост за ширината на КЯ от приложеното поле  $F$ . Зависимостта на ширината на КЯ от приложеното  $F$  е по-ясно изразена за ПарКЯ, отколкото за ПКЯ.



**Фиг. 43.** Енергиите на на преход като функция на приложено постоянно електрично поле  $F$  за трите ПарКЯ с ширини от 44, 22 и 11ML; съответно от горе надолу.  $E(C1-HH1)$  – квадрати;  $E(C1-LH1)$  – кръгчета;  $E(C2-HH2)$  – триъгълници.

**Фиг. 44** показва пресметнатите отмествания на Щарк (ОЩ) на основните оптични енергии на преход  $E(C1-HH1)$ ,  $E(C1-LH1)$  и  $E(C2-HH2)$ , без и в присъствието на постоянно  $F$  поле за трите параболични ПарКЯ. Открихме същата зависимост като на **Фиг. 43**. Наличните експериментални данни за подобни ПарКЯ [88] са в задоволително съгласие с нашите изчисления. В случая на по-тънките ями, 11 и 22 ML, се наблюдава една особеност за прехода ( $C2-HH2$ ) и на неговото ОЩ. Енергията на този преход в по-тънките ями нараства при прилагане на  $F$ , т.е. преходът показва синьо вместо червено отместване. Това предстои да бъде допълнително анализирано и да се потърси адекватно обяснение. Още повече, че не сме намирали експериментални данни за този преход в толкова тънки ями.



**Фиг. 44.** Отмествания на на Щарк (ОЩ) на енергиите на преход  $E(C1-HH1)$ ,  $E(C1-LH1)$  и  $E(C2-HH2)$  (съответно от ляво на дясно, както е посочено горе), по отношение на нулевата стойност на полето, и за различни ширини на ПарКЯ (44 ML - квадрати; 22 ML - триъгълници; 11 ML - кръгове).

При сравняването на критичното поле  $F$  (въз основа на ОЩ на основния оптичен преход  $E(C1-HH1)$ ) за ями с еднаква ширина (44 ML), то е по-ниско при ПарКЯ ( $\sim 71$  kV/cm, виж **Фиг. 42b**), от това за ПКЯ ( $\sim 212$  kV/cm, виж **Фиг. 31c**).

**Извод:** Проведени (с ТВ метода) са реалистични числени пресмятания на свързаните електронни състояния, свързаните дупчести състояния и техните пространствени разпределения без и с прилагане на различни стойности на надлъжното електрично поле  $F$  за ПарКЯ с различни ширини.

Определени са ОЩ в ПарКЯ с три ширини 11, 22 и 44 монослоя. И тук, както и при ПКЯ [37], влиянието на електричното поле е по-силно при по-широките ями. Зависимостта от ширината на КЯ при зададено едно и също  $F$  е по-ясно изразена за ПарКЯ, отколкото за ПКЯ.

Зависимостта от електричното поле е по-голяма за енергиите на преход ( $C1-HH1$ ) и за ( $C1-LH1$ ), отколкото за ( $C2-HH2$ ).

Критичната стойност на  $F$  за ями с еднаква ширина е по-ниска за ПарКЯ, отколкото за ПКЯ.

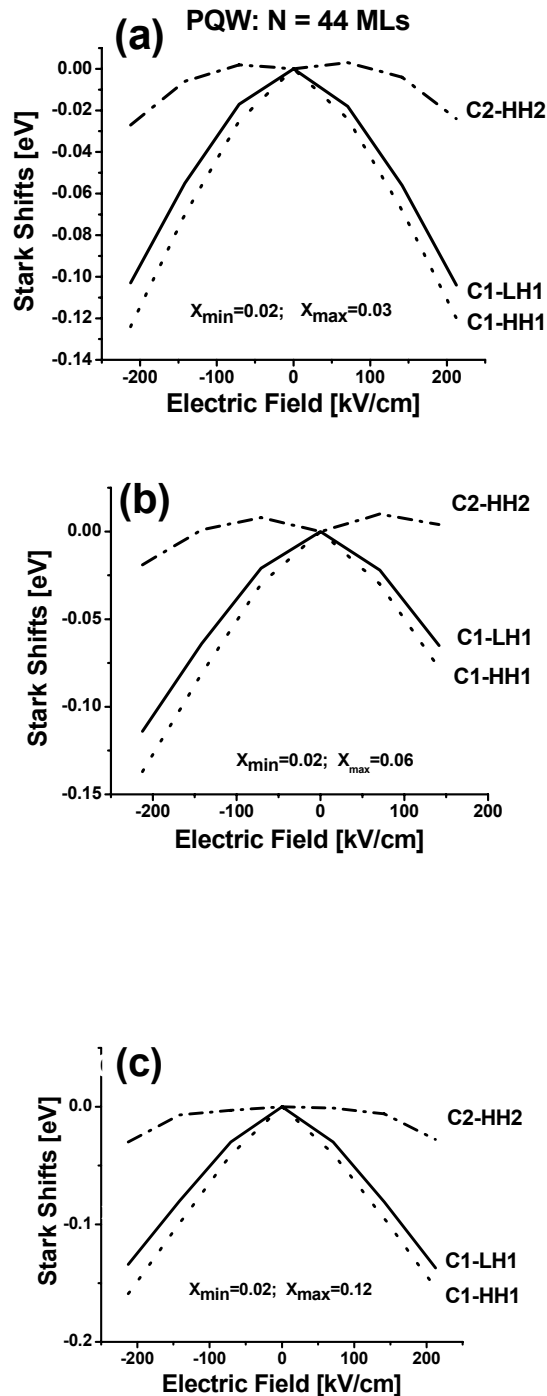
ПарКЯ е по-подходяща за приборни приложения отколкото ПКЯ.

### **8.1.3. ЕЩ в квантови ями с параболичен концентрационен профил (ПарКЯ) с различни дълбочини**

Представени са резултатите от численото пресмятане на единични квантови ями от тип  $Al_xGa_{1-x}As$ , с параболичен концентрационен профил (ПарКЯ), при прилагане на постоянно електрично поле перпендикулярно на интерфейсите [001]. Всички пресмятани ПарКЯ са с ширина равна на 44 монослоя. Концентрацията  $x$  на  $Al$  в бариерите  $Al_xGa_{1-x}As$  за всички разглеждани ями е постоянна и равна на  $x=0.36$ . Концентрацията  $x$  на  $Al$  в областта на самата яма се променя параболично от  $x_{min} = 0.02$  в левия и десен край на ямата до  $x_{max}$  в средата на ямата.  $x_{max}$  е равно на 0.03; 0.06 и 0.12 съответно за трите пресметнати ПарКЯ. Като ПарКЯ с  $x_{max}=0.12$  е най-плитка. Пресмятанията извършваме с ТВ в спиново зависим  $sp^3s^*$  базис и т.н., същия приложен и в предишната точка и в т.7, но сега и за КЯ с променлив химичен състав. Електричното поле сме прилагали между първия и последния монослой на КЯ в посока на кристалното израстване. В бариерните области за всички КЯ електричното поле е равно на нула  $F = 0$ .

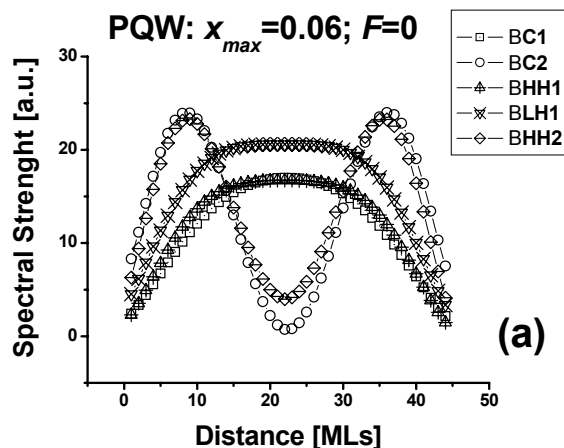
На **Фиг. 45** са дадени резултатите от пресметнатите стойности на отместванията на Щарк за енергиите на основните оптични преходи  $E(C1-HH1)$ ,  $E(C1-LH1)$  и  $E(C2-HH2)$ , за трите ПарКЯ от приложеното  $F$ . Забелязва се, че влиянието на  $F$  зависи съществено от дълбочината на ПарКЯ. С нарастване на приложеното електрично поле, отместванията на Щарк на трите ПарКЯ за

енергиите на преход нарастват, но по различен начин в зависимост от прехода и от концентрацията на  $Al$   $x_{max}$ . При зададена стойност на  $x_{max}$ : при по-голямо поле нарастването е по-голямо за  $E(C1-HH1)$  и  $E(C1-LH1)$ , отколкото за  $E(C2-HH2)$ . Нарастването на  $E(C1-HH1)$  е по-бързо от това на  $E(C1-LH1)$ . Виждаме и, че при дадена стойност на полето енергиите на преход са по-големи при по-високи стойности на  $x_{max}$  (т. е. при по-плитки ями, с по-висока концентрация на  $Al$ ).

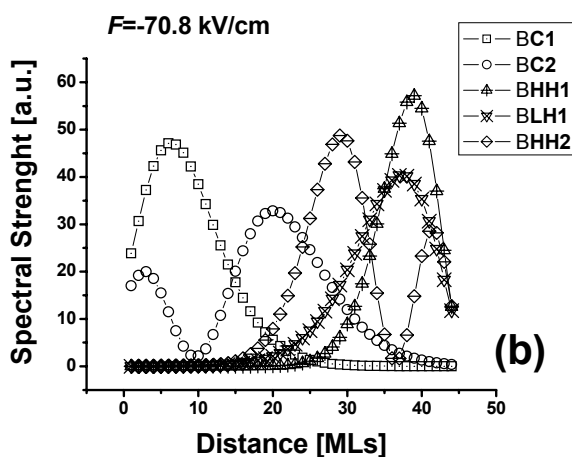


**Фиг. 45.** Зависимост на отместванията на Щарк за основните оптични енергии на преход в зависимост от приложеното  $F$ .  $E(C1-HH1)$ ,  $E(C1-LH1)$  и  $E(C2-HH2)$  при ПарКЯ, показани на фигурата чрез своите  $x_{max}$ :  
 (a)  $x_{max} = 0,03$ ,  
 (b)  $x_{max} = 0,06$ ,  
 (c)  $x_{max} = 0,12$ .





**Фиг. 46.** Пространствени разпределения за общата спектрална сила на състоянията  $C1$ ,  $C2$ ,  $HH1$ ,  $LH1$ ,  $HH2$  в ПарКЯ с концентрация на  $A/x_{max} = 0.06$  при приложени електрични полета  $F = 0$  (a) и  $F = -70.8 \text{ kV/cm}$  (b).



На **Фиг. 46** са представени резултатите за общата спектрална сила на пространствените разпределения на отделните състояния, а именно:  $C1$ ,  $C2$ ,  $HH1$ ,  $LH1$  и  $HH2$ . Това са резултатите за ПарКЯ с  $x_{max} = 0.06$ , при приложено електрично поле  $F = 0$  и  $F = -70.8 \text{ kV/cm}$  съответно на **Фиг. 46(a)** и **Фиг. 46(b)**. Зависимостите за останалите ПарКЯ, а именно с  $x_{max} = 0.03$  и  $x_{max} = 0.12$ , са аналогични. И за трите пресметнати ПарКЯ пространствените разпределения на спектралната сила са симетрично разпределени относително центъра на ПарКЯ при поле  $F = 0$ . И за трите ПарКЯ имаме пълно припокриване на пространствените разпределения при поле нула.

Отместването на пространствените разпределения на  $C1$ ,  $C2$ ,  $HH1$ ,  $LH1$  и  $HH2$ , се появява при поле  $F \neq 0$ . Това отместване и за трите разглеждани ПарКЯ нараства с нарастването на стойността на приложеното електрично поле  $F$ . При критичната стойност на полето, при която интензитетът на оптичния преход се стреми към нула, наблюдаваме пълна липса на пространствено припокриване между състоянията. От **Фиг. 46** се вижда, че за ПарКЯ с  $x_{max} = 0.06$  критичната стойност на полето е  $\sim 71 \text{ kV/cm}$ , тъй като тогава

припокриването на разпределенията за  $C1$  и  $HH1$  клони към нула. Освен това наблюдаваме и следната зависимост: колкото е по-висока концентрацията на  $Al$  в ПарКЯ, т.е. колкото е по-висока стойността на  $x_{max}$ , толкова е по-голямо отместването на съответното пространствено разпределение на съответното състояние с полето. С нарастването на приложеното електрично поле се осъществява и все по-пълно разделяне на електронните и дупчести състояния в ПарКЯ, тъй като полето премества електрони и дупки в различни посоки, което е валидно за всички КЯ. Критичната стойност на полето за прехода ( $C1-HH1$ ) при ПарКЯ с различни дълбочини (различно  $x_{max}$ ) е по-ниска за ями с по-голяма  $x_{max}$ .

**Извод:** Пресметнати са енергиите на основните електронни и дупчести състояния в квантови ями с параболичен концентрационен профил (ПарКЯ), които са с еднаква ширина, но с различна дълбочина, без и при прилагане на надлъжно постоянно електрично поле. Пресметнати са и енергиите на основните им оптични преходи с и без поле.

Влиянието на електричното поле  $F$  зависи съществено от дълбочината на ПарКЯ, като е по-силно при по-плитки ями, т.е. при по-високо съдържание на  $Al$ . Същата зависимост наблюдавахме и за ПКЯ с различни дълбочини.

Критичната стойност на полето за прехода ( $C1-HH1$ ) при ПарКЯ с ширина 44 ML се получава  $\sim 71\text{kV/cm}$ , когато дълбочината на ямата е  $x_{max}=0.06$ .

При сравнение с наличните експериментални и теоретични данни за ПКЯ с близък състав [26,27,37,38], се установява, че ПарКЯ са по-чувствителни към присъствието на надлъжно електрично поле отколкото правоъгълните квантови ями, когато става дума за ями с еднаква ширина.

## 8.2. Квантови ями с дифузия на интерфейсите

Надлъжният Щарк ефект в дифузни  $AlGaAs/GaAs$  квантови ями, израстнали по протежение на  $[001]$  посока, са подробно изследвани в [27]. Енергиите на основното състояние на електрона и дупката и първото възбудено дупчесто състояние са изчислени за различни дифузионни дължини и сила на електричното поле. Намерени са енергиите на основните оптични преходи и техните Щарк отмествания. Интензитетите на преходите са обсъдени от гледна точка на пространственото разпределение на свързаните състояния. Изчисленията са проведени в рамките на полуемпиричния  $sp^3s^*$  ТВ модел, включващ метода на съшиване на функциите на Грин на интерфейсите.

Реалните интерфейси на полупроводниковите квантови структури имат широчина от порядъка на два решетъчни параметъра [176,177]. Това променя характеристиките на техните електрични полета, особено за сравнително тънки ями и бариери [83,85,86,165,166]. Макар ефектът на Щарк да е изучаван главно върху по-простия случай на правоъгълни квантови ями (с атомно гладки и резки интерфейси в хетероструктурите), но в литературата се срещат неголям брой изследвания и на дифузни квантови ями [83,85,86].

Доколкото ни е известно, **няма ТВ изчисления на квантово ограничение Щарк ефект в дифузни квантови ями**. Моделът ТВ (на силната връзка) взема предвид реалната 3D кристална структура на твърдото тяло, наличието на много зони и съответното им смесване, заедно с равнинната периодичност на структурата на квантовата яма. Прилагаме метод, разработен в [28], за третиране на равнинни хетероструктури с нехомогенности в посоката на растежа. Той метод бе приложен успешно при дискутиране оптичните преходи в дифузни квантови ями [33] и на Щарк -отместванията в правоъгълни и с променлив състав квантови ями [26].

Квантовите ями, които сме изучавали, бяха експериментално израстнати и изследвани в [178]. Тази система е разгледана без приложено електрично поле в [33] и са получени резултати в добро съгласие с експерименталните данни. Ширината на първоначалната (както е израстнатата)  $Al_{0.2}Ga_{0.8}As/GaAs$  ПКЯ е 100 Å. Съставът на Al напреко на ямата след дифузията може да се намери от израза:

$$C(z) = C_b + (C_w - C_b)/2[\text{erf}(h - z)/L_D + \text{erf}(h + z)/L_D], \quad (44)$$

$z$  е посоката на кристалния растеж. В у-ние (44),  $C(z)$  е концентрацията на Al на разстояние  $z$  от центъра на ямата;  $C_w$ , концентрацията на Al в ямата преди дифузията;  $C_b$ , концентрацията на Al в бариера преди дифузията;  $2h$ , ширината на първоначалната яма; и  $L_D$ , дължината на дифузия. Някои автори определят  $L_D$  като  $(Dt)^{1/2}$  [84], където  $D$  е коефициентът на дифузия и  $t$  е времето на отгряване. Ние дефинираме  $L_D = 2(Dt)^{1/2}$  [178]. Уравнение (44) се използва широко в литературата (виж, например, [178]).

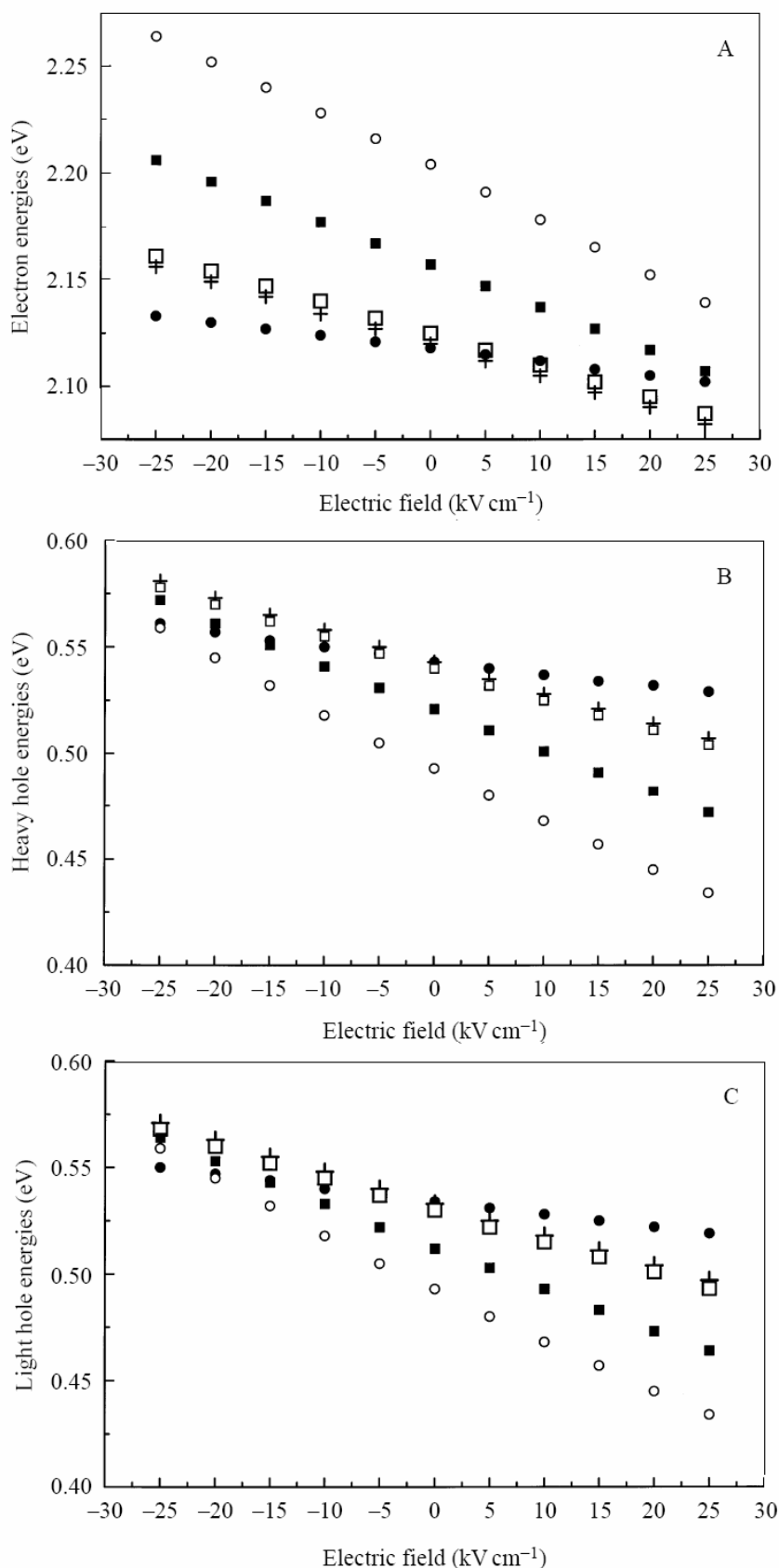
Всяка дифузна структура е разделена на три области, а именно външни хомогенни бариери с пренебрежима дифузия (концентрацията на Al в равнините на съшиване е 0.199) и вътрешния нехомогенен (дифузен) участък на ямата, имащ концентрационен профил, като определения от у-ние (44).

Размерът на нехомогенната плоча (slab) е 167, 131, и 95 монослоя, съответно, за  $L_D = 100, 70$  и  $35 \text{ \AA}$ . Функцията на Грин за външните бариери се изчислява от трансфер матрицата по обичайния начин, а Грин функцията на дифузията на участък на ямата се изчислява с помощта на вече създадения и използван за изследване на други разнородни структури алгоритъм [28].

На **Фиг. 47 (А-С)** енергиите на свързаните електронни състояния  $S1$ ,  $HH1$  и  $LH1$  спрямо силата на електричното поле са показани за електрони, тежки дупки и леки дупки, съответно. Различните криви съответстват на различни дифузионни дължини  $L_D$  ( $L_D = 0, 10, 20, 50$  и  $100 \text{ \AA}$ ). Зависимостите са линейни за всяка фиксирана стойност на  $L_D$ , но те имат различни наклони. Колкото е по-голяма дължината на дифузия, толкова е по-силна зависимостта. За всички състояния кривите с  $L_D = 10 \text{ \AA}$  са много близки до тези с  $L_D = 20 \text{ \AA}$ . От **Фиг. 47** можем да видим, че за електроните промените на енергията с  $L_D$  са по-силно изразени, ако електричното поле е отрицателно. Тези промени отразяват влиянието на два фактора, дифузията и полето. Дифузията движи енергиите далече от ръбовете на зоната [33] както за електрони, така и за дупки. Отрицателното поле увеличава този ефект за електрони и го намалява за дупки [26]. Положителното поле действа в обратна посока, то компенсира влиянието на дифузията за електроните и прави това влияние по-изразено при дупките.

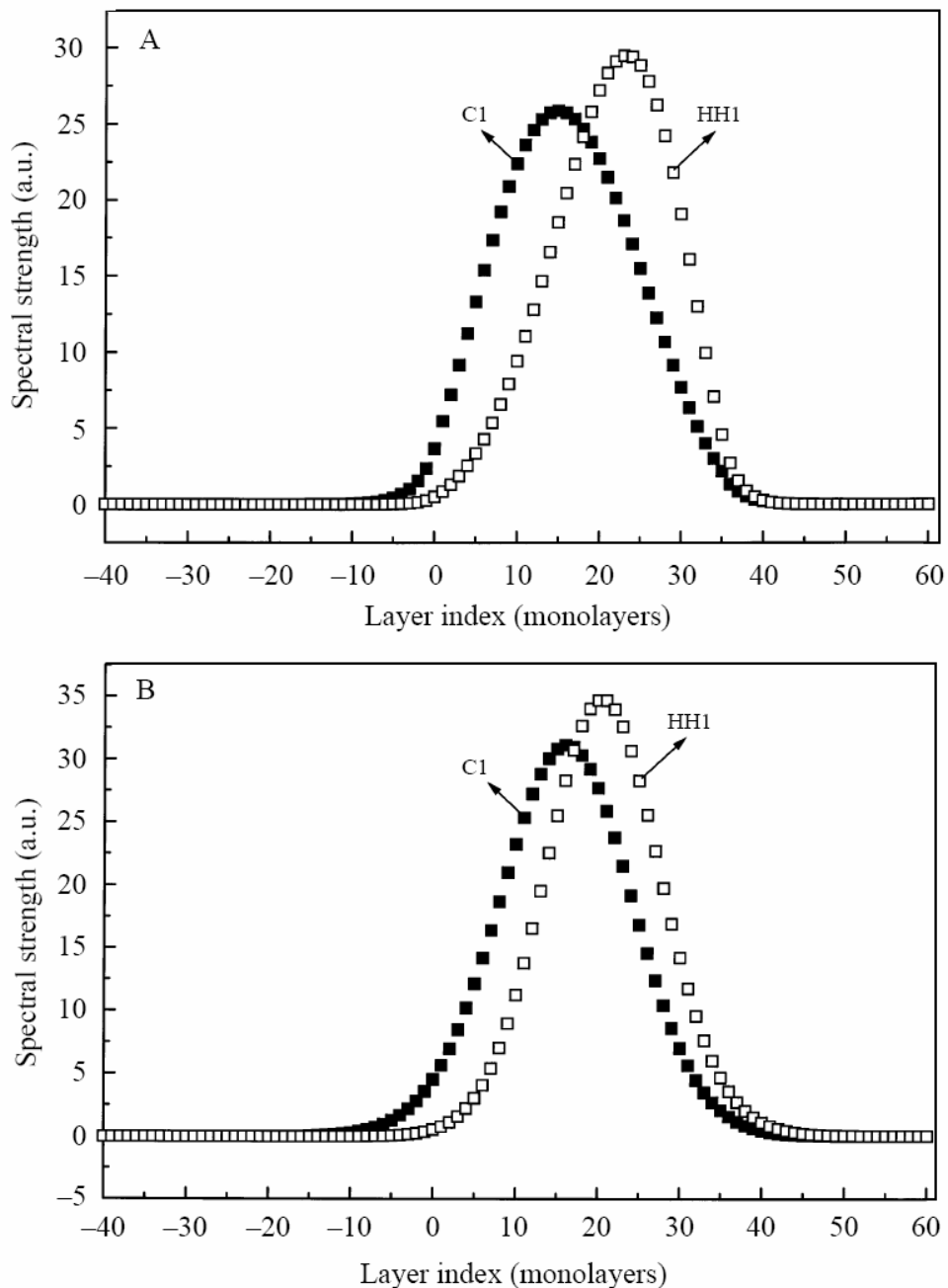
Отместванията на Щарк за различни дължини на дифузията  $L_D$  ( $L_D = 0, 10, 20, 50$  и  $100 \text{ \AA}$ ) за преходите  $S1-HH1$  и  $S1-LH1$  в **Табл. 3 и 4**, съответно. Ако дължината на дифузия  $L_D$  не е по-дълга от  $50 \text{ \AA}$ , Щарк отместванията са малко по-ниски, отколкото в правоъгълна яма ( $L_D = 0 \text{ \AA}$ ). Дължината на дифузия  $L_D = 100 \text{ \AA}$  създава отмествания, които са около три (шест) пъти по-високи, отколкото в правоъгълната квантова яма за преходите  $S1-HH1$  и  $S1-LH1$ , съответно.

Резултатите, показани в **Таблицы 3 и 4** и **Фиг. 47-49** разкриват нелинейните зависимости на Щарк отместванията и интензитетите на преход от дължината на дифузия. Очевидно е, че не е лесно да се изработи/проектира интуитивно дифузна квантова яма с по-добри характеристики на "Щарк отместване" в сравнение с това на зададена така израстната правоъгълна яма. Човек трябва да изчисли отместванията и интензитетите за широк кръг от параметрите на системата (ширина на ямата, височина на бариера, дължина на дифузия и сила на полето). Смятаме, че нашият подход е добър за тази цел.



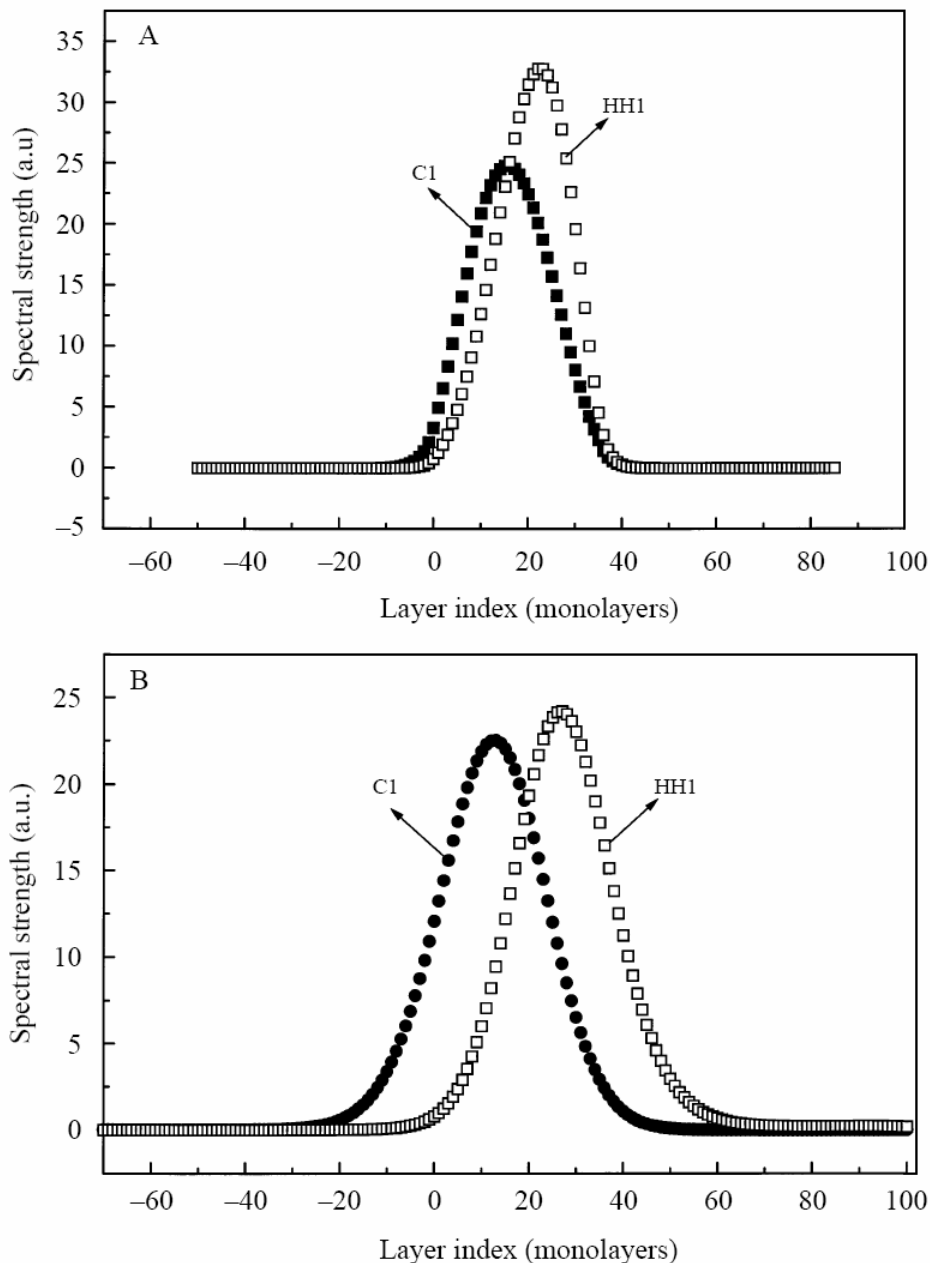
**Фиг. 47.** Зависимост на енергиите на свързаните състояния на: **(A)** електрон; **(B)** тежка дупка; **(C)** лека дупка от  $F$ . Така израстнатите  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$  правоъгълна квантови ями (крива с пълтни кръгчета) е с ширина от 100 Å. Представени са кривите на ДКЯ с дифузионни дължини  $L_D$  от 10 Å (кръстове), 20 Å (празни квадрати), 50 Å (пълтни квадрати) и 100 Å (празни кръгове).

**Фиг. 48.** представя пространствените разпределения в посоката на израстването на свързаните състояния, *C1* и *HH1* за дифузионни дължини  $L_D = 0 \text{ \AA}$  и  $50 \text{ \AA}$ , съответно, при напрегнатост на електричното поле  $F = -25 \text{ kV.cm}^{-1}$ . Пространственото припокриване между състоянията е даже още по-силно в дифузната яма, отколкото в правоъгълната яма. Както се вижда в **Табл. 5**, ОЩ на двете ями са практически равни при тези дължини на дифузията.



**Фиг. 48.** Пространствени разпределения в направление на растеж  $[0,0,1]$  на *C1* (запълнени квадрати) и *HH1* (празни квадрати) свързани състояния за така израстваната  $Al_{0.2}Ga_{0.8}As/GaAs$  ПКЯ (**A**) и дифузна КЯ (**B**). В случай B  $L_D = 50 \text{ \AA}$ . Напрегнатостта на електричното поле и в двата случая е  $-25 \text{ kV cm}^{-1}$ .

На **Фиг. 49 (A)** и **(B)**, пространствените разпределения на състоянията *C1* и *HH1* са показани за дифузионни дължини  $L_D = 0\text{Å}$  и  $100\text{Å}$ , съответно, при сила на електричното поле  $F = -20\text{ kV.cm}^{-1}$ . Може да се види, че въпреки това, че дифузията е толкова силна, все още има достатъчно пространствено припокриване, за да се осигури измерим интензитет на оптичния преход. В същото време, Щарк отместването на дифузната яма е значително по-голямо (около четири пъти) от това на правоъгълната яма.



**Фиг. 49.** Пространствени разпределения в направление на израстване  $[0,0,1]$  на *C1* (запълнени фигури) и *HH1* (празни квадрати) свързани състояния за така израстнатата  $Al_{0.2}Ga_{0.8}As/GaAs$  ПКЯ **(A)** и дифузна КЯ **(B)**. Дължината  $L_D$  на дифузия в случай B е  $L_D = 100\text{ Å}$ . Напрегнатостта на електричното поле и в двата случая е  $-20\text{ kV.cm}^{-1}$ .

**Таблица 3.** ОЩ на енергия на преход  $E(C1-HH1)$  в meV по отношение на стойността на нулевото поле за различни дифузионни дължини  $L_D$  в Å.

F (kV.cm <sup>-1</sup> )	-25	-20	-15	-10	-5	0	5	10	15	20	25
$L_D = 0 \text{ \AA}$	-2.1	-1.3	-0.8	-0.3	-0.1	0.0	-0.1	-0.3	-0.7	-1.3	-2.0
$L_D = 10 \text{ \AA}$	-1.8	-1.2	-0.7	-0.3	-0.1	0.0	0.0	-0.3	-0.7	-1.1	-1.9
$L_D = 20 \text{ \AA}$	-1.4	-0.8	-0.4	-0.1	0.0	0.0	0.0	-0.2	-0.4	-0.9	-1.3
$L_D = 50 \text{ \AA}$	-1.7	-1.0	-0.6	-0.2	0.0	0.0	0.0	-0.3	-0.6	-1.1	-1.7
$L_D = 100 \text{ \AA}$	-6.8	-4.2	-2.3	-1.1	-0.3	0.0	-0.3	-1.1	-2.3	-4.2	-6.8

**Таблица 4.** ОЩ на енергия на преход  $E(C1-LH1)$  в meV по отношение на стойността на нулевото поле за различни дифузионни дължини  $L_D$  в Å.

F (kV.cm <sup>-1</sup> )	-25	-20	-15	-10	-5	0	5	10	15	20	25
$L_D = 0 \text{ \AA}$	-1.3	-0.8	-0.4	-0.1	-0.1	0.0	0.0	-0.2	-0.5	-1.0	-1.5
$L_D = 10 \text{ \AA}$	-1.5	-1.0	-0.6	-0.3	-0.1	0.0	-0.1	-0.3	-0.6	-0.9	-1.5
$L_D = 20 \text{ \AA}$	-1.2	-0.7	-0.4	-0.1	0.0	0.0	0.0	-0.2	-0.4	-0.8	-1.2
$L_D = 50 \text{ \AA}$	-1.9	-1.2	-0.7	-0.3	0.0	0.0	0.0	-0.3	-0.7	-1.2	-1.9
$L_D = 100 \text{ \AA}$	-7.9	-4.7	-2.6	-1.2	-0.3	0.0	-0.3	-1.2	-2.6	-4.8	-7.8

**Изводи:** Представяме първите ТВ изчисления на квантово ограничения Щарк ефект в дифузни квантови ями (ДФЯ). Получените резултати показват практическата полза от нашия подход на реалистични емпирични ТВ изчисления. Ние установихме, че дифузията може да подобри характеристиките на "Щарк отместването" на дифузните квантови ями. Нашият метод може да се използва за търсене на набор от добри параметри на ямите, т.е. такива параметри, при които дифузията да подобрява характеристиките на "Щарк отместването".

Колкото е по-голяма дължината на дифузия, толкова е по-силна зависимостта на енергиите на свързаните електронни състояния  $C1$ ,  $HH1$  и  $LH1$  от силата на електричното поле.

ОЩ на основните оптични преходи  $C1-HH1$  и  $C1-LH1$  за ДКЯ са високи, отколкото в ПКЯ, при дължина на дифузия  $L_D$  по-голяма от  $50\text{\AA}$ , и обратното. Затова ДКЯ би имала потенциал за приложение при прибори с космическо приложение, където има гигантски температурни разлики.

Не сме намерили експериментални данни в литературата за Щарк ефект в дифузни квантови ями. Би било много полезно да се проучи този ефект експериментално и да го сравним с теоретичните резултати.



### 8.3. Аналогови и цифрови квантови ями

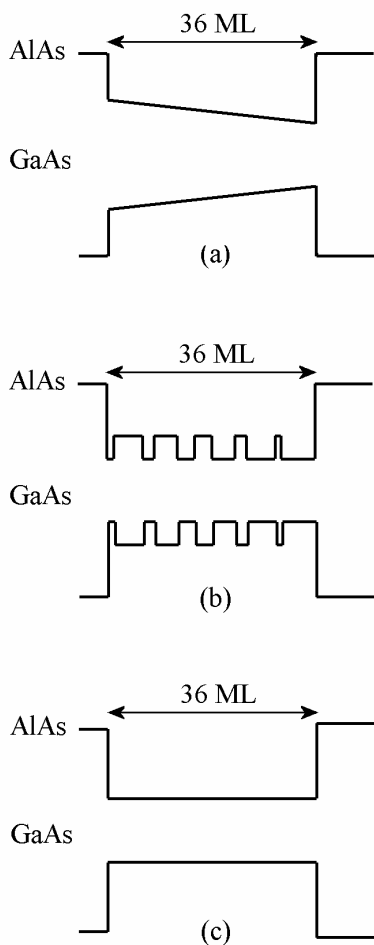
При производството на АКЯ (аналогови КЯ) (които се израстват с метода на аналоговата сплав [23,179]), директно се израстват нехомогенни КЯ с различни композиционни профили. Експериментално е технически трудно да се контролира прецизно състава на сплавта в тясната област на аналоговите КЯ и това води до някои структурни неравномерности вътре в КЯ. За да се реши този проблем, в [43,180] е развит и приложен алтернативен подход, наречен приближение на цифровата сплав. При ЦКЯ, постепенната промяна на профила на края на ЗЗ на аналоговите КЯ се заменя с последователност от ями и бариери с една и съща дълбочина, но с програмирана последователност от различни ширини [180,182,183].

Целта на проучването е да се сравнят тези два вида КЯ при приложено електрично поле [32], което не ни е известно все още да е правено. Въпреки че аналоговите и цифровите структури често се считат за еквивалентни, има някои повдигнати съмнения [30,179,184]. Доколкото ни е известно подобно сравнително изследване не е правено

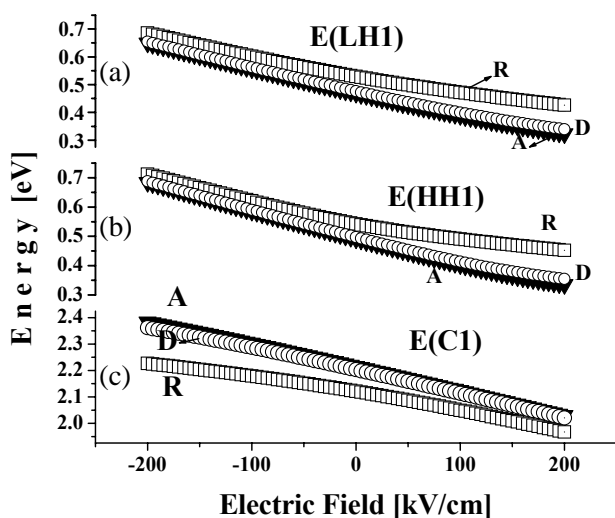
Ние изучаваме структурата на КЯ, които са аналог на слоеве  $AlAs/Al_xGa_{1-x}As/AlAs$  при променлив химичен състав (**Фиг. 50**). Електричното поле се прилага паралелно на оста на растеж [001] на слоевете. Подобна структура е частично проучена експериментално и теоретично в [43]. Електричното поле се прилага към изследваната структура в две точки в бариерните зони (от  $AlAs$ ), разположени на разстояние 5 ML от краищата на КЯ. Ширината на двете КЯ е 36 MLs (102 Å). Нулевата стойност на интензитета на приложеното електрично поле  $F$  се определя в точката, която съответства на 5 ML от левия край на КЯ. При числените пресмятания използваме широк спектър от електрически полета, от -200 до +200 kV / cm със стъпка 5 kV / cm. Също така направихме изчисления за конвенционалната правоъгълна КЯ, за да я сравним с нашите резултати. ПКЯ има ширина също равна на 36 MLs (102 Å) и е от  $GaAs$ , със бариери от  $AlAs$ . Всички изчисления се правят в центъра на двумерната зона на Брилуен.

**Фиг. 51** показва изчислените енергии на основните състояния в зоната на проводимост  $E (C1)$  и във валентната зона  $E (HH1)$ ,  $E (LH1)$  в трите вида изследвани КЯ спрямо приложеното  $F$ . Забелязваме, че ефектите на електричното поле са сходни за всички разглеждани КЯ. За валентните състояния, при еднаква стойност на  $F$ , ефектите на Щарк са по-силни за АКЯ и

ЦКЯ, отколкото за ПКЯ. За енергията на електрона тенденцията е противоположна.

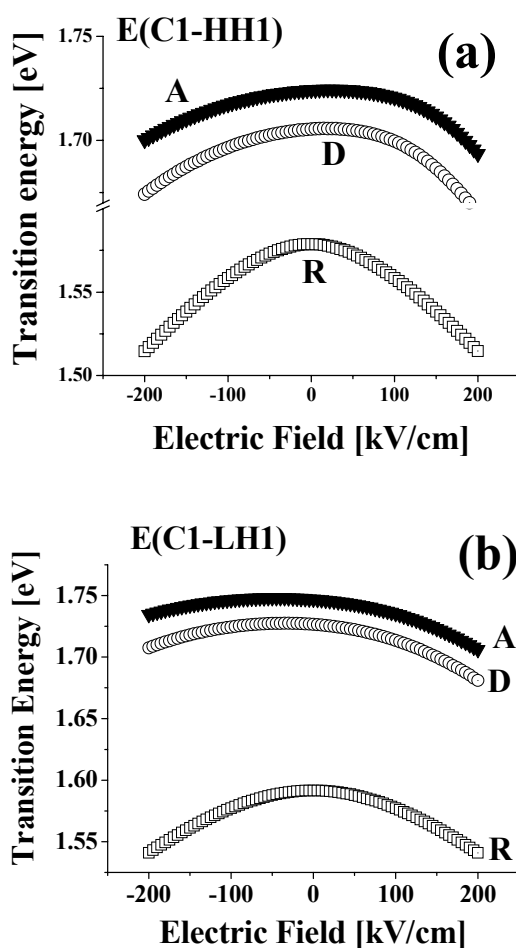


**Фиг. 50.** Схематична диаграма на: **(a)** истинска аналогова КЯ (АКЯ). Съставът на сплавта на  $Al_xGa_{1-x}As$  на КЯ варира линейно от  $x = 0.3$  до  $x = 0.0$  (от ляво на дясно на КЯ); **(b)** еквивалентната на нея цифрова КА (ЦКЯ). Съставът на сплавта  $x$  на вмъкнатите бариерни слоеве  $Al_xGa_{1-x}As$  е 0,3, минималната ширина на структурата е един монослой (ML), съставът на ямите на вмъкнатата област е  $x = 0$ ; **(c)** конвенционалната правоъгълна КЯ (ПКЯ). Съставът на сплавта  $x$  на ПКЯ ямата е 0, т.е. чист GaAs. В трите случая имаме бариери от чист AlAs.



**Фиг. 51.** Зависимост на енергиите на основните свързани състояния за: **(a)** –  $E(LH1)$  леки дупки; **(b)** –  $E(HH1)$  тежки дупки; **(c)** –  $E(C1)$  електрони, от напрегатостта на приложеното  $F$ ; А (АКЯ) – триъгълници, D (ЦКЯ) – кръгове, R (ПКЯ) – квадрати.

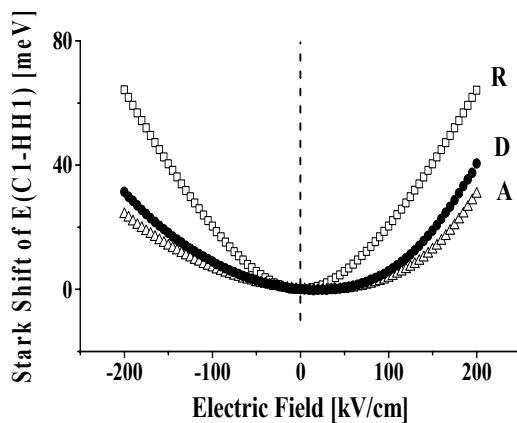
**Фиг. 52** показва зависимостта на енергията на основния оптичен преход  $E(C1-HH1)$  от приложеното  $F$  за трите КЯ. Влиянието на електричното поле върху тези КЯ е качествено равностойно. При увеличаване на приложеното електрично поле, енергията на прехода намалява. В целия диапазон на електричното поле стойността на енергията  $E(C1-HH1)$  за АКЯ е по-голяма от съответната стойност за ЦКЯ. **Фиг. 52b** показва зависимостта на енергията на основния оптичен преход  $E(C1-LH1)$  от електричното поле за трите КЯ. Влиянието на електричното поле за трите КЯ е подобно на  $E(C1-HH1)$ . Енергията на преход намалява с увеличаване на приложеното електрично поле.



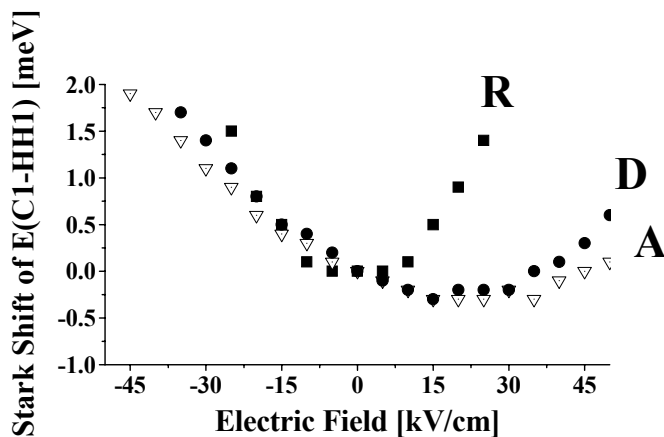
**Фиг. 52.** Зависимост на основните енергии на преход: (a)  $E(C1-HH1)$  и (b)  $E(C1-LH1)$  от приложеното  $F$ ; A (АКЯ) – триъгълници, D (ЦКЯ) – кръгове, R (ПКЯ) – квадрати.

**Фиг. 53** показва отместванията на Щарк на основната оптична енергия на прехода  $E(C1-HH1)$  от приложеното външно постоянно електрично поле за трите КЯ и данните при ниски полета са представени в леко увеличен мащаб на **Фиг. 54**. Енергията на отместванията на Щарк се определя като абсолютната стойност на разликата на тази енергия при дадено електрично поле минус

стойността на тази енергия при поле нула. Зависимостта на отместванията на Щарк за трите КЯ е подобна. Увеличението на полето увеличава отместванията на Щарк. Това увеличение е по-ясно изразено за ЦКЯ, отколкото за АКЯ, за всички стойности на полето  $F$ . Това нарастване е по-добре изразено и при ПКЯ, отколкото при ЦКЯ и АКЯ, в областта на големите стойности на приложеното електрично поле. За ниски електрически полета (по-малки от  $\sim 20$  kV / cm) отместванията на Щарк на ПКЯ са по-малки, отколкото за ЦКЯ и АКЯ. Изводът е, че структурата на ЦКЯ вероятно ще бъде приложима за високоскоростни оптични модулатори с ниско напрежение на задвижване.

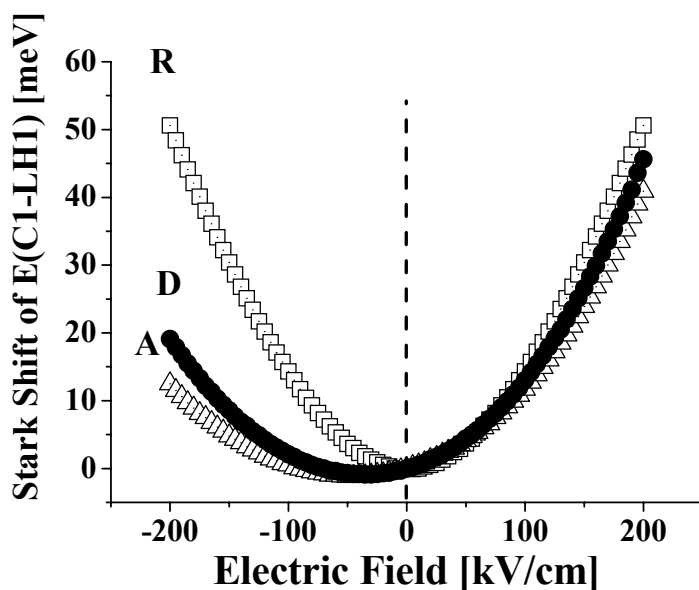


**Фиг. 53.** ОЩ на основната енергия на преход: изместване на енергията  $E(C1-HH1)$ ,  
 A (АКЯ) - триъгълници,  
 D (ЦКЯ) - кръгове,  
 R (ПКЯ) - квадрати.



**Фиг. 54.** ОЩ на основната енергия на преход: изместване на енергията  $E(C1-HH1)$ ,  
 A (АКЯ) - триъгълници,  
 D (ЦКЯ) - кръгове,  
 R (ПКЯ) - квадрати. Това е част от **Фиг. 53**, но с друг мащаб по осите  $x$  и  $y$ .

**Фиг. 55** показва същата зависимост като на **Фиг. 53**, но за енергията на прехода  $E(C1-LH1)$ . От сравнението може да се види, че влиянието на  $F$  върху ОЩ в трите КЯ е подобно на  $E(C1-HH1)$ . С увеличаването на приложеното поле се нарастват отместванията на Щарк.



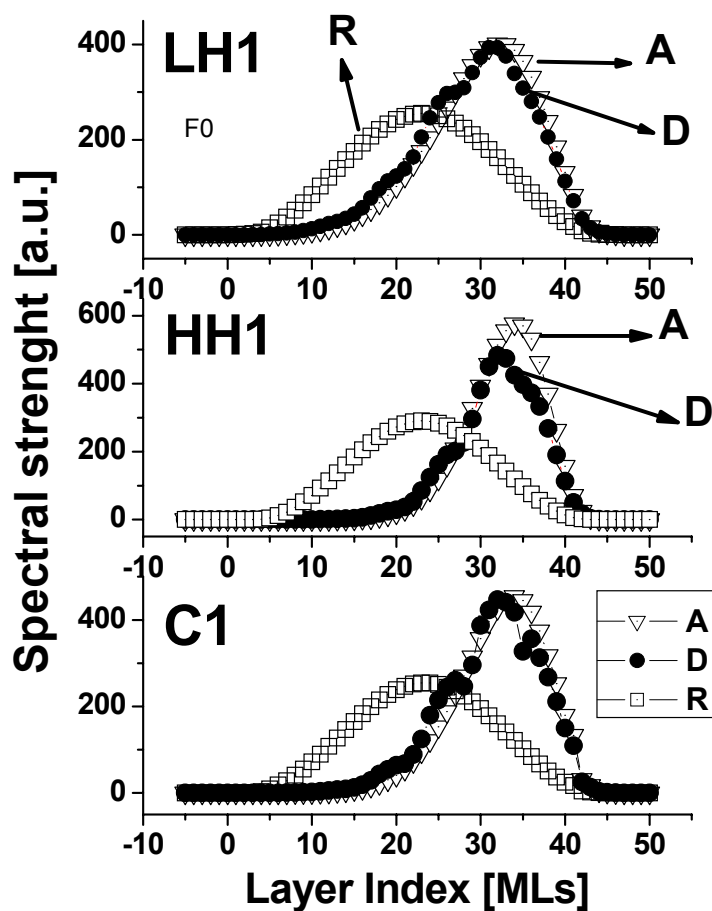
**Фиг. 55.** ОЩ на основната енергия на преход: изместване на енергията  $E(C1-LH1)$ ,  
 А (АКЯ) - триъгълници,  
 D (ЦКЯ) - кръгове,  
 R (ПКЯ) - квадрати.

В **Таблица 5** са дадени някои разлики в ОЩ (измерени и пресметнатите от Ishikawa и съавт. [43] (виж фиг. 3 от [43]) за ЦКЯ, АКЯ и ПКЯ. Тези резултати се сравняват с изчисленията от нас [32] резултати с описания по-горе ТВ модел. Изчислението в [43] е направено в приближението на ефективната маса, а експерименталните данни за ОЩ в [43] са получени чрез метода на абсорбционната спектроскопия. Дребните несъответствия вероятно се дължат на разликата между реалните и идеалните структури на ЦКЯ. Изчислените стойности обаче са за идеални КЯ, които всъщност се различават от тези на измервания профил на състава. При нас енергиите на ОЩ се изчисляват не при стайна температура, а при температура  $T = 0$  K, т.е. екситонните ефекти не са включени в нашите изчисления.

Резултатите от пространствените разпределения на общата спектралната сила са представени на **Фиг. 56-57**. Приложената интензивност на електричното поле  $F$  е 0 (**Фиг. 56**) и -100 kV / cm (**Фиг. 57**). За трите КЯ има пълно припокриване на пространствените разпределения при  $F = 0$ . При електричното поле  $F$  различно от 0 се наблюдава изместване на пространствените разпределения на състоянията  $C1$ ,  $NH1$  и  $LH1$ . То е по-голямо за аналогови и цифрови КЯ, отколкото за правоъгълни КЯ. В случая на ЦКЯ някои характеристики започват да се проявяват и да отразяват неговата мултиямна/многоямна структура [30]. Този тип поведение, разбира се, никога не се появява в АКЯ.

**Таблица 5.** Сравнение на изчислените в дисертацията стойности с изчислените и експериментални стойности от литературата [43] за ОЩ (в meV) на  $E(C1-HH1)$  за АКЯ, ЦКЯ и ПКЯ. Интензивността на приложеното електрично поле  $F$  е дадена в kV / cm.

Ел. Поле $F$ , [kV/cm]	ОЩ за $E(C1-HH1)$ , [meV]						
	Дисертация	ПКЯ		Дисертация	ЦКЯ		Дисертация
		[43]	[43]		[43]	[43]	
		Теор.	Експер.		Теор.	Експер.	
50	5,7	4		2,9	7,5		2,2
100	20,3	14		8,9	18,2		6,9
20	0,8		0,38	0,8			0,6
25	1,5		0,85	1,1			0,9
35	2,9		1,3	1,7			1,4
10	0,1			0,4		0,9	0,3
60	8			3,8		9,4	3
90	16,9			7,4		13	5,8



**Фиг. 56.** Пространствени разпределения на общата спектрална сила за състояния  $C1$ ,  $HH1$  и  $LH1$  в А (АКЯ) - триъгълници, D (ЦКЯ) - кръгове, R (ПКЯ) - квадрати. Интензивността на електричното поле е  $F=0$  kV / cm.

**Извод:** За първи път се прави подробно сравнително изследване на ЕЩ на КЯ с променлив състав от типа аналогови (АКЯ) и цифрови (ЦКЯ). То показва наличие на малки разлики в отместванията им на Щарк, въпреки че двете КЯ се считат за еквивалентни, а и липсва подобно изследване.

Увеличението на ОЩ на енергиите на основните оптични преходи  $E(C1-NH1)$  и  $E(C1-LH1)$  с нарастване на електричното поле е по-ясно изразено за ЦКЯ, отколкото за АКЯ в целия диапазон на  $F$ . Все пак този ефект е по-голям при ПКЯ, отколкото при ЦКЯ и АКЯ, в областта на големите стойности на  $F$ .

При ниски полета ( $F$  под  $\sim 20 \text{ kV / cm}$ ) тези отмествания на Щарк за ЦКЯ и АКЯ, макар и малко, но са по-големи, отколкото за ПКЯ при еднаква ширина на ямите. Затова смятаме, че структурата на ЦКЯ вероятно ще е най-приложима за високоскоростни оптични модулатори с ниско напрежение на задвижване,

Мултиямният характер на ЦКЯ започва да се визуализира в пространствените разпределения на основните състояния  $C1$ ,  $NH1$  и  $LH1$ .

Такива проучвания ще помогнат за намирането на потенциален профил на КЯ с по-добри характеристики на ЕЩ. Изследването на въздействията на електричното поле върху оптичните свойства на структурите с КЯ с променлив състав (каквито са и АКЯ и ЦКЯ) е от съществено значение за оптимизирането на устройствата работещи на КЯ.

#### **IV. Заключение:**

Създадена е програма за пресмятане по метода на силната връзка (ТВ) на електронните състояния в квантови ями (КЯ) с произволен концентрационен профил при прилагане на постоянно надлъжно електрично поле.

Основно предимство на нашите пресмятания по ТВ метода е получаването на много повече свързани състояния, отколкото пресмятанията в приближенията на ефективната маса и обвиващата функция. Така благодарение на ТВ метода по-точно се интерпретират оптичните спектри на различни квантови ями в сравнение с моделни пресмятания от по-прости модели.

За първи път с ТВ метода детайлно е изучен ефектът на Щарк (ЕЩ) в квантови ями с постоянен (правоъгълни) и променлив (параболични, дифузионни, аналогови и цифрови) химичен състав. Направено е сравнение на пресметнатите резултати за тези КЯ, както и с данни от експерименти на други изследователи, и с резултати от други налични модели, където съществуват.

Направеното литературно проучване съпоставя част от изследваните тук КЯ с вече действащи или проектирани прибори за микроелектрониката, работещи на базата на КЯ и ЕЩ.

Смятаме, че по този начин сме изпълнили поставените в дисертацията задачи.

В перспектива, резултатите позволяват да се прогнозира по-добре оптичните свойства на квантовите ями при различни работни параметри. Предложеният в тази дисертация анализ на квантови ями в присъствие на електрично поле може да се използва за предсказване на свойствата на нови, експериментално неполучавани и неизследвани досега квантови ями и структури. Такъв е примерът с пресметнатите от нас дифузни квантови ями. Това ще улесни научното търсене на нови материали, притежаващи уникални електронни и оптични свойства, за специфични приборни приложения в различни области на микроелектрониката и космоса.



## ПРИНОСИ:

1. Изготвена е програма за пресмятане по метода на силната връзка (ТВ) на електронните състояния в квантови ями (КЯ) от типа GaAs/AlGaAs с произволен концентрационен профил при прилагане на постоянно електрично поле  $F$ .
2. За първи път с ТВ метод е изследван ефект на Щарк (ЕЩ) в правоъгълни и параболични КЯ. Установено е, че  $F$  влияе по-силно при по-широките и по-плитки КЯ, с превес на параболичните, при които и критичното поле е по-ниско.
3. За първи път с ТВ метод е изследван ЕЩ в дифузионни КЯ. Установено е, че с нарастване на дифузионната дължина се подобряват характеристиките на Щарк отместването дотолкова, че дори надминават тези за правоъгълни КЯ.
4. За първи път с ТВ метод е сравнен ЕЩ в аналогови и цифрови КЯ, смятани за еквивалентни. Установено е по-силно отместване на Щарк за цифровите КЯ в широк диапазон на  $F$ .
5. Приборни приложения:
  - параболичната КЯ е по-подходяща от правоъгълната за по-чувствителни прибори, основани на ЕЩ, напр. бързи превключватели;
  - цифровата КЯ, с най-големи отмествания на Щарк при ниски  $F$ , е подходяща за високоскоростни оптични модулатори с ниско напрежение на задвижване;
  - правоъгълната КЯ е подходяща за множество прибори с добра чувствителност по отношение на ЕЩ, работещи в широк диапазон от по-високи полета;
  - дифузната КЯ с отместване на Щарк при големи дифузионни дължини има потенциал при прибори с космическо приложение, където има гигантски температурни разлики.

## Списък на често използвани в дисертацията съкращения:

КЯ, QWs, QW – квантова яма, квантови ями  
ПКЯ, RQW – правоъгълна квантова яма  
ПарКЯ, PQW - параболична квантова яма  
ЦКЯ – цифрова квантова яма  
АКЯ – аналогова квантова яма  
ДКЯ – дифузионна квантова яма  
ЕЩ, QCSE, SE - *квантово-ограничен* ефект на Щарк  
ОЩ, QCSS - *квантово ограничено отместване на Щарк или само отместване на Щарк* (Stark shift)  
ЗБ - зона на Брилуен  
ЗП - зоната на проводимост  
ЗЗ – забранена зона  
ВЗ – валентна зона  
F, EP - електрично поле  
ТВ, ETB - метода на силната връзка (tight-binding method), полуемпиричен метод на силната връзка  
SGFM - метод на съшиване на Гриновите функции на повърхността, (surface Green function matching method)  
CP, SL – свръхрешетки  
КЖ, QW - квантови жички  
КТ, QD - квантови точки  
MBE - молекулярно-лъчева епитаксия (molecular beam epitaxy)  
MOCVD - метало-органична епитаксия от газова фаза (химическата епитаксия от пари на метало-органични съединения - (metal-organic chemical vapor deposition)  
ФЛ - фотолуминесценция  
GCQWs - *КЯ с променлив химичен състав* (Graded-concentration QWs), GGQWs - *КЯ с променлива забранена зона, Graded-gap QWs*.  
EMA - Методът на ефективната маса (effective mass approximation)  
EFA - приближението на обвиващите функции (envelope function approximation)  
LDOS - локалната плътност на състоянията  
HEMT - транзистори с висока подвижност на електроните

## **А. Научни публикации, върху които е изградена дисертацията**

1. **A. Miteva**, R. Yakimova, "Stark effect in rectangular and graded composition quantum wells: a tight-binding calculation"; in Proceedings of 9<sup>th</sup> International School on Condensed Matter Physics "Future directions in thin film science and technology", Varna, September 9<sup>th</sup> - 13<sup>th</sup>, 1996, Bulgaria, Eds. J.M.Marshall, N.Kirov, A.Vavrek, J.M.Maud, World Scientific, Singapore, ISBN 9810230990, pp. 548-551, 1997.
2. **A. Miteva**, "Electric Field Influence on the Electronic States in Rectangular Quantum Wells", "Доклади на БАН" /Comptes Rendus de l'Academie Bulgare des Sciences/, vol. 51, No 9-10, pp. 69-72, 1998.
3. S. J. Vlaev, **A. M. Miteva**, D. A. Contreras-Solorio and V. R. Velasco, "Stark effect in diffused quantum wells", Superlattices and Microstructures, **26** (5), pp. 325-332, 1999.
4. **A. Miteva**, "Stark effect in some nanostructures", SES 2010, Proceedings 2011, BAS, Space and Solar-Terrestrial Research Institute, ISSN 1313-3888, pp. 201-206, 2011.
5. **A. Miteva**, "Electric field effects in some semiconductor graded-gap quantum wells", The Proceedings of the Second Bulgarian National Congress on Physical Sciences, 25–29 September 2013, Sofia, Bulgaria, Section: Condensed Matter Physics, New Materials, Cryogenic Physics, CD: ISBN 978-954-580-333-8, Publisher: Heron Press Ltd., Paper S04.3 (4 pages), 2013.
6. **A. M. Miteva**, "On the main application properties of the Quantum Confined Stark Effect", International journal for science, technics and innovations for the industry "Machines, Technologies, Materials, Technologies, Materials", ISSN PRINT 1313-0226, ISSN WEB 1314-507X, Year VIII, Issue 4, pp. 19-22, 2014. <http://stumejournals.com/journals/mtm/2014/4/19/pdf>
7. **A. M. Miteva**, "Digital versus analog graded-gap quantum wells in the presence of applied electric field", International journal for science, technics and innovations for the industry "Machines, Technologies, Materials", ISSN PRINT 1313-0226, ISSN WEB 1314-507X, Year XI, Issue 5, pp. 236-239, 2017. <https://stumejournals.com/journals/mtm/2017/5/236/pdf>

## **Б. Цитати на публикациите, включени в дисертацията**

Публикация 3 е цитирана в:

1. A. Ramirez-Morales, J. C. Martínez-Orozco, I. Rodríguez-Vargas, Quantum confined Stark effect in Gaussian quantum wells: A tight-binding study, AIP Conference Proceedings, Volume 1598, pp. 150-153, (2014).
2. M. Pattammal, Peter, A. John, Stark Effect Dependence on Donor Binding Energy in a Wurtzite  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  Quantum Dot, Quantum Matter, **2** (2), 132-136, (2013).
3. A. Bouzekova-Penkova, About the properties of some nanostructures with uniform electric field presence, Proceedings of 26-th International Scientific Conference, 13-16 September, 2010, Sozopol, Bulgaria, 300-305, ISBN: 978-954-438-854-6, (2010).
4. A. Di Carlo, Microscopic theory of nanostructured semiconductor devices: beyond the envelope-function approximation, Semiconductor Science and Technology, **18**, R1-R31, (2003).
5. M. Pattammal, PhD "Quantum size effects on hydrogenic impurity states in zinc blende nanostructure", Madurai Kamraj University, Department of Physics, Madurai, India, August 2012, (see reference in chapter 5), (2012)  
<http://shodhganga.inflibnet.ac.in:8080/jspui/handle/10603/136493>  
[http://shodhganga.inflibnet.ac.in:8080/jspui/bitstream/10603/136493/11/11\\_chapter%205.pdf](http://shodhganga.inflibnet.ac.in:8080/jspui/bitstream/10603/136493/11/11_chapter%205.pdf)

Публикация 2 е цитирана в:

6. S. Vlaev, V. R. Velasco, "Electronic States in Non-Rectangular Semiconductor Quantum Wells: Tight Binding Calculations", in: Proceedings of the 9th Latin American Congress "Surface Science and its Applications", La Habana, Cuba, 5-9 July 1999; World Scientific, ISBN 981-02-4396-0, pp.259-268 (2000).

Публикация 1 е цитирана в:

7. S. Vlaev, V. R. Velasco, "Electronic States in Non-Rectangular Semiconductor Quantum Wells: Tight Binding Calculations", in: Proceedings of the 9th Latin American Congress "Surface Science and its Applications", La Habana, Cuba, 5-9 July 1999; World Scientific, ISBN 981-02-4396-0, pp.259-268 (2000).

## **В.Списък на част от научните форуми, където са докладвани основни резултати от тази дисертация – 17 броя**