

УДК 621.383.46

## МОДЕЛИРОВАНИЕ QD-INAS/GAAS ГЕТЕРОСТРУКТУР ДЛЯ ФОТОДЕТЕКТОРОВ БЛИЖНЕГО ИК-ДИАПАЗОНА

Блохин Э.Е.

*Южно-Российский государственный политехнический университет  
им. М.И. Платова, Новочеркасск, e-mail: holele@mail.ru*

Предложена конструкция гетероструктуры QD-InAs/GaAs для фотодетекторов ближнего ИК-диапазона. Структура содержит матрицу из одного массива InAs квантовых точек на смачивающем слое толщиной 3 монослоя, покрытого закрывающим слоем GaAs толщиной 30 нм. Разработана теоретическая модель структуры, позволяющая провести исследование спектров фотолюминесценции в области ближнего ИК-диапазона (1100 нм) и влияния температуры на свойства структуры. Показаны три пика спектров фотолюминесценции межзонных переходов. Первый пик на длине волны 850 нм, следом наиболее интенсивный пик в квантовых точках на уровне  $\lambda = 1080$  нм и менее интенсивный пик смачивающего слоя на 1150 нм. Результаты проведенного моделирования показывают ухудшение свойств структуры при повышении температуры. Интенсивность спектров фотолюминесценции сводится к нулю при комнатной температуре (300 К). Максимальные значения интенсивности достигаются при температуре 77 К.

**Ключевые слова:** моделирование, численные методы, фотодетектор, ближний ИК-диапазон, квантовые точки InAs, фотолюминесценция

## SIMULATION QD-INAS/GAAS HETEROSTRUCTURE FOR NEAR INFRARED PHOTODETECTORS

Blokhin E.E.

*The M.I. Platov South-Russian State Polytechnic University, Novocherkassk, e-mail: holele@mail.ru*

The article presents design of the heterostructure QD-InAs/GaAs for near infrared photodetectors. The structure comprises a matrix of one array InAs quantum dots on the wetting layer 3 monolayer coated closing GaAs layer thickness of 30 nm. A theoretical model of the structure, which allows to conduct a study of the photoluminescence spectra in the near infrared range (1100 nm) and the effect of temperature on the properties of the structure. Showing three peaks of the photoluminescence spectra of interband transitions. The first peak at 850 nm, followed by the most intense peak in quantum dots at  $\lambda = 1080$  nm and less intense peak wetting layer 1150 nm. The results of the simulation show deterioration of the structure with increasing temperature. The intensity of the photoluminescence spectra is reduced to zero at room temperature (300 K). The maximum values of intensity are achieved at a temperature of 77 K.

**Keywords:** simulation, numerical methods, photodetector, the near-infrared range, quantum dots InAs, photoluminescence

Начиная с 1992 года ведется активная работа по изучению фотодетекторов, содержащих наноразмерные объекты в своей структуре (квантовые ямы, квантовые точки) [7, 14]. На данный момент эффективность таких структур не превышает 10% [8], однако интерес к ним продолжает расти за счет технологических и электрофизических особенностей данных материалов. Наиболее изученными являются гетероструктуры с массивами квантовых точек InAs в матрице GaAs [1, 5]. Обнаружительная способность таких структур составляет порядка  $D^* = 3 \cdot 10^8$  см<sup>2</sup>·Гц<sup>1/2</sup> при комнатной температуре [6]. Данные структуры, при межзонном поглощении, дают пик чувствительности в диапазоне 1,1–1,5 мкм [11], что удовлетворяет зоне ближнего ИК.

В данной работе предложена QD-InAs/GaAs гетероструктура для фотодетектора ближнего ИК-диапазона, на основании которой проведено моделирование спектров

фотолюминесценции. Для проверки достоверности модели проведен сравнительный анализ результатов компьютерного моделирования с результатами сторонних исследовательских работ в данной тематике.

### Теоретическое обоснование модели

Прежде чем перейти к описанию основных уравнений модели, необходимо сделать ряд допущений, связанных с различными подходами к моделированию структур на квантовых точках. Рассмотрим подробнее данные допущения.

1. После изучения ряда работ по раннему моделированию структур на квантовых точках [9, 12, 13] была выбрана пирамидальная форма квантовых точек в бесконечной полупроводниковой матрице.

2. Так как квантовые точки InAs являются центрами захвата электронов, справедливо, что неоднородность деформации не вносит изменений в энергетический спектр электронных состояний.

3. В предлагаемой модели рассматриваются только межзонные переходы. Соответственно, справедливо допущение, что в каждой квантовой яме, образованной квантовой точкой, содержится по одному дискретному уровню.

4. При моделировании использовался метод периодического потенциала Кронига – Пенни с учетом вклада влияния упругой деформации на эффективные массы носителей заряда.

### Основные уравнения модели

Основополагающими уравнениями фотопреобразовательных структур являются уравнение Пуассона и уравнение непрерывности. Взяв закон Гаусса и Максвелла:

$$\nabla E = \frac{\rho}{\varepsilon}; \quad \nabla B = \mu J + \frac{1}{v^2} \frac{\partial E}{\partial t}, \quad (1)$$

где  $E$  – энергия электрического поля;  $\rho$  – плотность носителей заряда;  $\varepsilon$  – диэлектрическая проницаемость материала;  $B$  – магнитное поле;  $\mu$  – магнитная проницаемость;  $J$  – плотность тока;  $v$  – скорость света в среде, можно определить электрический потенциал в уравнении Пуассона и уравнение непрерывности.

Включив в уравнение непрерывности составляющие механизмов генерации и рекомбинации, получим уравнения непрерывности для электронов и дырок:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} &= \frac{1}{q} \nabla J_n - R_n + G; \\ \frac{\partial p}{\partial t} &= -\frac{1}{q} \nabla J_p - R_p + G, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $t$  – время;  $q$  – заряд электрона;  $n$  и  $p$  – концентрации электронов и дырок;  $J_n$  и  $J_p$  – плотности электронного и дырочного тока;  $R_n$  и  $R_p$  – скорости рекомбинации электронов и дырок;  $G$  – скорость генерации электронно-дырочных пар.

Как говорилось выше, квантовые точки в модели представляются в виде квантовых

ям. Следовательно, мы будем иметь дело с двумерным электронным газом и уравнение для статистики распределения примет следующий вид:

$$N(E) = 2 \frac{m_n^*}{\pi h^2} \sum_i \Theta(E - E_i), \quad (3)$$

где  $\Theta$  – ступенчатая функция Хевисайда;  $h$  – постоянная Планка. Далее получаем двумерное выражение для концентрации электронов:

$$n = 2 \frac{m_n^* kT}{\pi h^2} \sum_i \ln \left( 1 + \exp \left( -\frac{E_i - E_F}{kT} \right) \right). \quad (4)$$

Для учета локализации заряда по всей ширине квантовой ямы вводим соответствующую плоскую волновую функцию (выражение для направления оси роста структуры –  $x$ ):

$$\begin{aligned} n(x, T) &= 2 \frac{m_n^* kT}{\pi h^2} \sum_i |\Psi_i(x)|^2 \times \\ &\times \ln \left( 1 + \exp \left( -\frac{E_i - E_F}{kT} \right) \right). \end{aligned} \quad (5)$$

Для дальнейшего решения необходимо знание зонной структуры (расположение валентной зоны и зоны проводимости), которое получается решением уравнения Шредингера с участием эффективных масс носителей заряда (ниже выражение для электронов):

$$-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m_n^*} \nabla \Psi_i + E_C \Psi_i = E_i \Psi_i. \quad (6)$$

Для моделирования зонной структуры была взята модель периодического прямоугольного потенциала Кронига – Пенни, модифицированная с условием действия равномерного поля деформации. Схематично модель прямоугольного потенциала изображена на рис. 1.

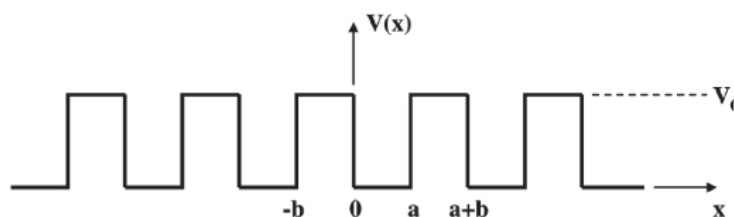


Рис. 1. Модель потенциала Кронига – Пенни

Модель потенциала представляет собой решение уравнения Шредингера в виде двух трансцендентных уравнений вида

$$\cos k(a+b) = \frac{Q^2 - K^2}{2QK} \sinh(Qb) \sin(Ka) + \cosh(Qb) \cos(Ka), \quad E < V_0; \quad (7)$$

$$\cos k(a+b) = -\frac{\beta^2 - K^2}{2\beta K} \sin(\beta b) \sin(Ka) + \cos(\beta b) \cos(Ka), \quad E > V_0, \quad (8)$$

где  $K, Q, \beta$  – локальные волновые векторы:

$$K^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad V = 0, \ll E; \quad (9)$$

$$Q^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}, \quad V = 0, E < V_0; \quad (10)$$

$$\beta^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}, \quad V = 0, E > V_0, \quad (11)$$

Энергия определяется через волновой вектор функции Блоха:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (12)$$

Для моделирования спектров фотолюминесценции нами было выбрано стандартное выражение для излучательного потока [10].

$$I_{PL} = n(T, x) \left( \frac{1/\tau_r}{1/\tau_{es} + 1/\tau_{nr} + 1/\tau_r + \tau_{ex}} \right). \quad (13)$$

где  $1/\tau_{ex}$  – характеризует механизм перехода носителей заряда из зоны проводимости,

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

Для учета вклада термоэлектронной эмиссии воспользуемся моделью, описанной в [10] с некоторыми модификациями. Выражения для плотностей носителей заряда:

$$J_n = qv_n(1+\delta)(n_2 - n_1 e^{-\Delta E_c/kT});$$

$$J_p = -qv_p(1+\delta)(p_2 - p_1 e^{-\Delta E_v/kT}), \quad (14)$$

где  $\delta$  – коэффициент термоэлектронной эмиссии;  $v_n$  и  $v_p$  – скорости теплового движения электронов и дырок соответственно;  $\Delta E_c$  и  $\Delta E_v$  – различия энергий в зоне проводимости и валентной зоне.

Коэффициент термоэлектронной эмиссии:

$$\delta = \frac{1}{kT} \int_{E_m}^{E_c(0)} dE \exp\left(\frac{E_c(0) - E}{kT}\right) \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^{x_E} dx \sqrt{2m_n^*(E_c(0) - E(x))}\right), \quad (15)$$

где  $E_c(0)$  – энергия в начальной точке потенциала;  $E_m = \max[E_c(0), E_c(W)]$  – максимальное значение энергии на всей ширине барьера ( $W$ ).

Рекомбинация по модели Шокли – Рида – Холла учитывает ловушки захвата носителей заряда вблизи разрешенных зон. Обозначим через  $N_t$  плотность ловушек захвата, имеющих энергию  $E_t$  в пределах ширины запрещенной зоны. В этом случае скорость рекомбинации будет иметь вид

$$R_{SRH} = \frac{\sigma_n \sigma_p v_n N_t (np - n_i^2)}{\sigma_n (n + n_i e^{(E_t - E_i)/kT}) + \sigma_p (p + n_i e^{(E_i - E_t)/kT})}, \quad (16)$$

где сечения захвата заряженных ловушек  $\sigma_n$  и нейтральных ловушек  $\sigma_p$ ;  $n_i$  – собственная концентрация носителей. Для удобства моделирования перепишем выражение (16) с учетом времени жизни носителей заряда:

$$\tau_n = \frac{1}{\sigma_n v_n N_t}; \quad \tau_p = \frac{1}{\sigma_p v_p N_t}; \quad (17)$$

$$R_{SRH} = \frac{np - n_i^2}{\tau_n (n + n_i e^{(E_t - E_i)/kT}) + \tau_p (p + n_i e^{(E_i - E_t)/kT})}. \quad (18)$$

### Исходные данные для построения модели

Для построения модели была предложена гетероструктура с массивом InAs квантовых точек, изображенная на рис. 2.

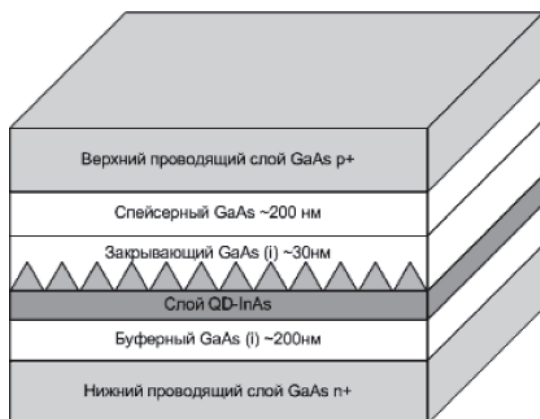


Рис. 2. Структура с массивом InAs квантовых точек

Моделируемая структура содержит слой GaAs с шириной запрещенной зоны 1,4 эВ и значением концентрации  $3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ . Далее идет еще один слой GaAs толщиной 200 нм с подвижностью носителей заряда  $8500 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$  (для электронов) и  $400 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$  (для дырок). Следом слой InAs толщиной 3 монослоя и один массив квантовых точек InAs с поверхностной плотностью  $10^{10} \text{ см}^{-2}$  и латеральными размерами 35 нм. Далее два слоя GaAs, один толщиной 30 нм, второй толщиной 200 нм. Завершающий слой GaAs имеет значение концентрации  $3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ .

### Результаты исследования и их обсуждение

Зонная структура, рассчитанная по модели Кронига – Пенни, дала следующие результаты. За ширину потенциальной ямы были взяты размеры квантовых точек арсенида индия. Проведенные расчеты показали разницу энергий зоны проводимости между GaAs и InAs порядка 0,59 эВ. Расхождение значений эффективной массы у границ потенциальной ямы составили  $0,024m_0$ , а у границы барьера –  $0,067m_0$ . Различие энергии согласуется с теоретическими данными для структур подобного рода [12].

Результаты, полученные из зонной модели, были использованы для построения спектров фотолюминесценции. На рис. 3 представлены спектры фотолюминесценции рассматриваемой структуры в зависимости от температуры. Наблюдаются три пика зависимости, два из них в области среднего ИК-диапазона и один в коротко-

волновой области. Спектральный пик на длине волны 850 нм (I на графике) связан с рекомбинацией в слое GaAs. Интенсивность пика мала, что говорит о вкладе безызлучательных переходов и о малой доле проникающего излучения. Наибольшей интенсивностью обладает пик II (1080 нм), характеризующий основные переходы в массиве квантовых точек InAs. В нашей модели ширина пика составила 0,15 эВ при допущении однородности квантовых точек по размерам, однако на практике ширина и интенсивность пика основных переходов в квантовых точках могут отличаться, так как зависят от размеров квантовых точек. Пик III смещен в область длинных волн и характеризует вклад смачивающего слоя. При получении массива квантовых точек смачивающий слой представляет собой раствор  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ . Оптимальным и наиболее изученным считается состав раствора с содержанием 35% In [2, 3, 4, 15]. Разработанная модель дает пик смачивающего слоя на длине волны порядка 1,15 мкм, что соответствует ширине запрещенной зоны раствора  $\text{Ga}_{0,75}\text{In}_{0,25}\text{As}$  и согласуется с работами по получению структур подобного рода.

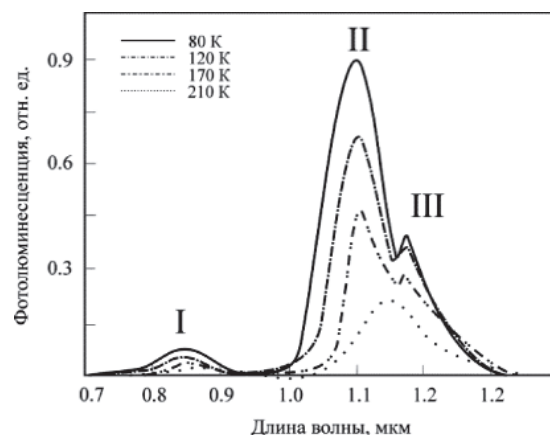


Рис. 3. Спектры фотолюминесценции

Стоит отметить, что все три пика имеют ярко выраженную зависимость от температуры. При увеличении температуры интенсивность пиков резко падает. Это говорит о преобладании процессов, связанных с температурой, повышается вероятность перехода носителей заряда за счет термоэлектронной эмиссии.

Проведя сравнительный анализ с работами [2, 4, 15], можно сказать, что выбранная модель дает достаточно корректные результаты и может быть доработана для сопоставления с экспериментальными данными. Интересно наблюдать, что в рассматриваемых работах по изучению спектров фотолюминесценции наблюдаются четыре

пика активности. Четвертый пик, как правило, смещен в область среднего ИК и составляет 1,4–1,6 мкм. Данный спектральный отклик обусловлен присутствием квантовых точек большего латерального размера (дисперсия размеров массива квантовых точек).

### Выводы

Предложена конструкция гетероструктуры (QD-InAs/GaAs) с массивом квантовых точек InAs для фотодетекторов ближнего ИК-диапазона. Разработана математическая модель построения зонной структуры и спектров фотолюминесценции на основании модели Кронига–Пенни и метода эффективных масс при межзонных переходах. Получены спектры фотолюминесценции с пиками интенсивности 1100 нм для основных межзонных переходов в квантовых точках, что говорит о возможности использования данной структуры в ближнем ИК-диапазоне. Установлено, что повышение температуры ведет к деградации эффективности структуры и сводится к нулю при комнатной температуре (300 К). Оптимальная температура для работы структуры составляет 77 К. Стоит отметить, что рассматриваемая структура с массивом квантовых точек при температуре 77 К имеет показатели эффективности выше, нежели другие наноструктуры (сверхрешетки, квантовые ямы и т.д.) [3]. Это говорит о перспективах дальнейшего изучения структур на квантовых точках и о возможности поднятия диапазона рабочих температур в перспективе до комнатной температуры.

Разработанная модель будет использоваться как основа для дальнейшего исследования внутризонных переходов в подобных структурах для фотодетекторов среднего и дальнего ИК-диапазонов.

### Список литературы

1. Лунин Л.С., Сысоев И.А., Алфимова Д.Л., Чеботарев С.Н., Пашенко А.С. Исследование фоточувствительных гетероструктур InAs/GaAs с квантовыми точками, выращенных методом ионно-лучевого осаждения // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2011. – Т. 6 – С. 58–62.
2. Лунин Л.С., Сысоев И.А., Алфимова Д.Л., Чеботарев С.Н., Пашенко А.С. Фотолюминесценция гетероструктур i-GaxIn1-xAs/n-GaAs со стохастическим массивом квантовых точек InAs // Неорганические материалы. – 2011 – Т. 47. – № 8. – С. 907–910.
3. Bailey C.G., Polly S.J., Okvath J., Forbes D.V., Cress C.D., Hubbard S.M., and Raffaele R.P. Temperature dependent photoluminescence spectroscopy of InAs/GaAs solar cells // IEEE Photovoltaic Specialists Conference (2010 35th) – USA 2010 – P. 000364–000369.
4. Chang W.-H., Hsu T.M., Huang C.C., Hsu S.L., Lai C.Y., Yeh N.T., Nee T.E., and Chyi J.-I. Photocurrent studies of the carrier escape process from InAs self-assembled quantum dots // Phys. Rev. B – 2000. – Vol. 62, № 11 – P. 6959–6962.
5. Cusack M.A., Briddon P.R., Jaros M. Electronic structure of InAs/GaAs self-assembled quantum dots // Phys. Rev. B – 1996. – Vol. 54, № 4 – P. 2300–2303.
6. David A. Ramirez, Jiayi Shao, Majeed M. Hayat, and Sanjay Krishna. Midwave infrared quantum dot avalanche photodiode // Appl. Phys. Lett. – 2010. – Vol. 97 – P. 212–215.

7. Dong Pan, Elias Towe. Normal-incidence intersubband In, Ga As/GaAs quantum dot infrared photodetectors // Applied physics letters – 1998. – Vol. 73, № 14 – P. 1937–1939.
8. Grundmann M., Stier O., Bimberg D. InAs/GaAs pyramidal quantum dots: Strain distribution, optical phonons, and electronic structure // Phys. Rev. B – 1995. – Vol. 52, № 16 – P. 11969–11981.
9. Jiang H., Singh J. Strain distribution and electronic spectra of InAs/GaAs self-assembled dots: An eight-band study // Phys. Rev. B – 1997. – Vol. 56, № 8 – P. 4696–4701.
10. Noda S., Abe T., Tamura M. Mode assignment of excited states in self-assembled InAs/GaAs quantum dots // Phys. Rev. B – 1998. – Vol. 58, № 11 – P. 7181–7187.
11. Perera A.G.U., Aytac Y., Ariyawansa G., Matsik S.G., Buchanan M. Photo Detectors for Multi-Spectral Sensing // IEEE International Conference on Nanotechnology (Portland August 15–18, 2011). – USA, 2011. – P. 286–291.
12. Pryor C. Eight-band calculations of strained InAs/GaAs quantum dots compared with one-, four-, and six-band approximations // Phys. Rev. B – 1998. – Vol. 57, № 12 – P. 7190–7195.
13. Rajeev V. Shenoj, Jessie Rosenberg, Thomas E. Vanderveelde. Multispectral Quantum Dots-in-a-Well Infrared Detectors Using Plasmon Assisted Cavities // IEEE Journal of Quantum Electronics – 2010. – Vol. 46, № 7 – P. 1051–1057.
14. Ryzhii V. The theory of quantum-dot infrared phototransistors // Semicond. Sci. Technol. – 1996. – № 11. – P. 759–765.
15. Stier O., Grundmann M., Bimberg D. Electronic and optical properties of strained quantum dots modeled by 8-band k-p theory // Phys. Rev. B – 1999. – Vol. 59, № 8. – P. 5688–5701.

### References

1. Lunin L.S., Sysoev I.A., Alfimova D.L., Chebotarev S.N., Pashchenko A.S. Poverkhnost. Rentgenovskie, sinkhrotronnye i neytronnye issledovaniya. 2011. Vol. 6, pp. 58–62.
2. Lunin L.S., Sysoev I.A., Alfimova D.L., Chebotarev S.N., Pashchenko A.S. Neorganicheskie materialy. 2011, Vol. 47, no. 8, pp. 907–910.
3. Bailey C.G., Polly S.J., Okvath J., Forbes D.V., Cress C.D., Hubbard S.M., Raffaele R.P. IEEE Photovoltaic Specialists Conference (2010 35th). USA 2010, pp. 000364–000369.
4. Chang W.-H., Hsu T.M., Huang C.C., Hsu S.L., Lai C.Y., Yeh N.T., Nee T.E., Chyi J.-I. Phys. Rev. B. 2000, Vol. 62, no. 11, pp. 6959–6962.
5. Cusack M.A., Briddon P.R., Jaros M. Phys. Rev. B. 1996, Vol. 54, no. 4, pp. 2300–2303.
6. David A. Ramirez, Jiayi Shao, Majeed M. Hayat, and Sanjay Krishna. Appl. Phys. Lett. 2010, Vol. 97, pp. 212–215.
7. Dong Pan, Elias Towe. Applied Physics Letters. 1998, Vol. 73, no. 14, pp. 1937–1939.
8. Grundmann M., Stier O., Bimberg D. Phys. Rev. B. 1995, Vol. 52, no. 16, pp. 11969–11981.
9. Jiang H., Singh J. Phys. Rev. B. 1997, Vol. 56, no. 8, pp. 4696–4701.
10. Noda S., Abe T., Tamura M. Phys. Rev. B. 1998, Vol. 58, no. 11, pp. 7181–7187.
11. Perera A.G.U., Aytac Y., Ariyawansa G., Matsik S.G., Buchanan M. IEEE International Conference on Nanotechnology (Portland August 15–18, 2011). USA, 2011, pp. 286–291.
12. Pryor C. Phys. Rev. B. 1998, Vol. 57, no. 12, pp. 7190–7195.
13. Rajeev V. Shenoj, Jessie Rosenberg, Thomas E. Vanderveelde. IEEE journal of quantum electronics. 2010, Vol. 46, no. 7, pp. 1051–1057.
14. Ryzhii V. Semicond. Sci. Technol., 1996, 11, pp. 759–765.
15. Stier O., Grundmann M., Bimberg D. Phys. Rev. B. 1999, Vol. 59, no. 8, p. 5688–5701.

### Рецензенты:

Лунин Л.С., д.ф.-м.н., профессор, заведующий отделом, ФГБУН «Южный научный центр» Российской академии наук, г. Ростов-на-Дону;

Панич А.Е., д.т.н., профессор, директор – главный конструктор НКТБ «Пьезо-прибор», Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону.