

І.В. Бойко<sup>1</sup>, М.В. Ткач<sup>2</sup>, Ю.О. Сеті<sup>2</sup>

## Самоузгоджений розрахунок потенціального профілю GaN/AlN резонансно-тунельних структур

<sup>1</sup>Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, вул. Руська 56, м. Тернопіль, e-mail: [boyko.i.v.theory@gmail.com](mailto:boyko.i.v.theory@gmail.com)

<sup>2</sup>Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, вул. Коцюбинського, 2, м. Чернівці, e-mail: [krf@chnu.edu.ua](mailto:krf@chnu.edu.ua)

Для резонансно-тунельної структури з GaN – потенціальними ямами та AlN – потенціальними бар'єрами виконано розрахунок внутрішніх полів, спричинених виникаючими у наноструктурі п'єзоелектричною та спонтанною поляризаціями.

У моделі ефективних мас для електрона та моделі діелектричного континууму з використанням методу скінченних різниць знайдено самоузгоджені розв'язки системи рівнянь Шредінгера та Пуассона з урахуванням внеску п'єзоелектричної та спонтанної поляризації.

На основі знайдених розв'язків системи рівнянь Шредінгера та Пуассона для резонансно-тунельної структури, що слугувала каскадом експериментально реалізованого квантового каскадного детектора, виконано розрахунок її потенціального профілю та електронного енергетичного спектру. Встановлено, що розрахована величина детектованої енергії відрізняється від експериментально отриманої не більше ніж на 3 %.

**Ключові слова:** квантовий каскадний детектор, резонансно-тунельна структура, п'єзоелектрична поляризація, спонтанна поляризація, потенціальний профіль.

*Стаття постуила до редакції 17.07.2017; прийнята до друку 05.09.2017.*

### Вступ

Значний науковий прогрес у сучасній фізиці напівпровідників становить дослідження роботи квантових каскадних детекторів (ККД) [1-3] та дослідження фізичних процесів, що відбуваються у напівпровідникових резонансно-тунельних структурах (РТС), які є їх активними елементами. В даний час по відношенню до фізичної природи, що протікають у ККД можна виділити два їх типи.

До першого типу відносяться ККД, шари РТС яких створені на основі арсенідних середовищ: GaAs, InAs, AlAs, GaInAs та ін., кристалічні ґратки яких відносяться до групи симетрії  $A^{III}B^V$ . ККД цього типу працюють у середньому та дальньому інфрачервоному діапазонах електромагнітних хвиль й при цьому їх робота можлива лише при забезпеченні низьких температур (охолодження рідким азотом). Робота ККД цього типу добре досліджена експериментально [1-3] і теоретично [4-6].

До другого типу слід віднести ККД шари РТС яких створені на основі анізотропних напівпровідникових

середовищ, утворених нітридними сполуками GaN, AlN [7-9], кристалічні ґратки яких також відносяться до групи симетрії  $A^{III}B^V$ . Суттєвою особливістю нітридів групи  $A^{III}B^V$  є те, що у роботі ККД на їх основі необхідним є урахування їх анізотропних властивостей. Оскільки у елементарних ґратках вюрцитного типу, яку зазвичай мають нітриди групи  $A^{III}B^V$ , сумарний дипольний момент кожної ґратки є некомпенсованим, а також на гетеромежах багат шарових РТС на їх основі виникає неузгодженість постійних ґраток, що призводить до виникнення спонтанної та п'єзоелектричної поляризації. Таким чином, сумарна макроскопічна поляризація, що виникає у шарах РТС, створює внутрішнє електричне поле, що суттєво деформує потенціальний профіль наноструктури. Глибокі потенціальні ями у шарах РТС, що забезпечує роботу наноприладів у ближньому інфрачервоному діапазоні електромагнітних хвиль, та їх ефективне функціонування при значно вищих температурах, визначають значний науковий та прикладний інтерес ККД на основі нітридів групи  $A^{III}B^V$ . Проте, не зважаючи на цілий ряд робіт [10-15] із дослідження

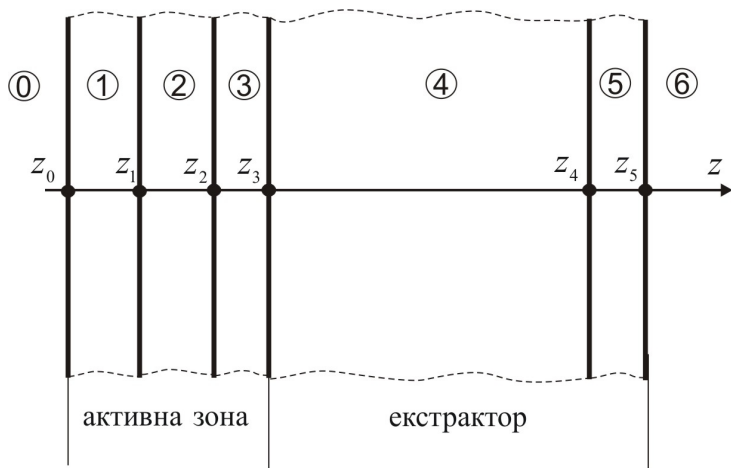


Рис. 1. Геометрична схема багатошарової РТС.

механізмів виникнення у РТС внутрішніх полів, на даний момент не існує послідовної теорії, яка б дала змогу виконати розрахунки потенціальних профілів для багатошарових РТС каскадів ККД з урахуванням внеску п'єзоелектричної та спонтанної поляризації. Це пов'язано з тим, що підхід до розрахунку потенціальних профілів РТС, запропонований у згаданих роботах є досить грубим, оскільки дозволяє врахувати лише внесок внутрішніх полів у величину ефективного потенціального профілю [10-13] або базується на чисельному моделюванні розв'язків самоузгодженої системи рівнянь Шредінгера та Пуассона [14, 15]. Також він може бути реалізованим лише на потужних ЕОМ.

У пропонованій роботі з урахуванням внеску п'єзоелектричної та спонтанної поляризації знайдено самоузгоджені розв'язки системи рівнянь Шредінгера та Пуассона. З їх використанням розвинена квантово-механічна теорія стаціонарних електронних станів у плоскій РТС як активній зоні ККД.

Для РТС експериментально досліджуваного ККД

ближнього інфрачервоного діапазону з GaN-потенціальними ямами та AlN-потенціальними бар'єрами самоузгоджений розрахунок електронного потенціального профілю, стаціонарного енергетичного спектру та величини детектованої енергії.

## I. Самоузгоджені розв'язки рівнянь Шредінгера і Пуассона

У декартовій системі координат розглядається багатошарова РТС, яка розташована таким чином, що вісь OZ є перпендикулярною до меж поділу шарів наноструктури (рис. 1). При цьому вважається, що середовищам (0), (1), (3), (5), (6) відповідають напівпровідниковому матеріалу AlN, середовищу (2) – GaN, середовищу (4) –  $Al_{0,58}Ga_{0,42}N$ .

Застосовуючи для електрона модель ефективних мас маємо:

$$m(z) = m_0 \left\{ q(-z) + q(z - z_5) + \sum_{p=0}^2 \left[ q(z - z_{2p}) - q(z - z_{2p+1}) \right] \right\} + m_1 [q(z - z_1) + q(z - z_2)] + m_2 [q(z - z_3) + q(z - z_4)], \quad (1)$$

де  $q(z)$  - одинична функція Хевісайда,  $z_{-1} \rightarrow -\infty$ ,  $z_6 \rightarrow \infty$ , а  $m_0 = m^{(0)} = m^{(1)} = m^{(3)} = m^{(5)} = m^{(6)}$ ,  $m_1 = m^{(2)}$  і  $m_2 = m^{(4)}$  - ефективні маси електрона в потенціальних бар'єрах та ямах РТС відповідно.

Аналогічно для діелектричної проникності РТС можна записати:

$$e(z) = e^{(0)} \left\{ q(-z) + q(z - z_5) + \sum_{p=0}^2 \left[ q(z - z_{2p}) - q(z - z_{2p+1}) \right] \right\} + e^{(1)} [q(z - z_1) + q(z - z_2)] + e^{(2)} [q(z - z_3) + q(z - z_4)], \quad (2)$$

$e^{(0)} = e^{(1)} = e^{(3)} = e^{(5)} = e^{(6)}$ ,  $e_1 = e^{(2)}$  і  $e_2 = e^{(4)}$  - діелектричні проникності матеріалу шарів РТС.

Енергетичний спектр електрона  $E_n$  та його

хвильові функції  $\Psi_n(E_n, z)$  визначаються шляхом розв'язування самоузгодженої системи рівнянь Шредінгера та Пуассона:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left( \frac{1}{m(z)} \frac{d\Psi(z)}{dz} \right) + V(z)\Psi(z) = E\Psi(z), \\ \frac{d}{dz} \left( e(z) \frac{df_H(z)}{dz} \right) = -r(z) \end{cases}, \quad (3)$$

де  $r(z)$  - густина зарядів у межах РТС, а ефективний потенціал для електрона визначається як:

$$V(z) = \Delta E_C(z) + V_H(z) + V_{ex}(z) + V_E(z), \quad (4)$$

У співвідношенні (4):

$$\Delta E_C(z) = \begin{cases} 0.719(E_g(\text{AlN}) - E_g(\text{GaN})), & z < 0, 0 \leq z < z_1, z_2 \leq z < z_3, z_4 \leq z < z_5, z > z_5 \\ 0, & z_1 \leq z < z_2 \\ 0.719(E_g(\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}) - E_g(\text{GaN})), & z_3 \leq z < z_4 \end{cases}, \quad (5)$$

- потенціальний профіль РТС для електрона, розрахований без урахування електричного поля п'єзоелектричної та спонтанної поляризації, де залежність ширини забороненої зони для  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  напівпровідника від температури  $T$  задається емпіричним співвідношенням Варшні [13-15]:

$$E_g(x, T) = E_g(x, 0) - \frac{a(x)T^2}{b(x) + T}, \quad (6)$$

причому залежності від величини  $x$ :

$$E_g(x, 0) = x^2 + 1.59x + 3.51;$$

$$a(x) = (2.15x^2 - 0.46x + 0.94) \cdot 10^{-3}, \quad (7)$$

$$b(x) = 1561x^2 - 270x + 791$$

У співвідношенні (4):

$$V_H(z) = e\mathbf{j}_H(z) \quad (8)$$

- потенціал, який є розв'язком рівняння Пуассона у системі рівнянь (3).

Далі у (4):

$$V_{ex}(z) = -\left(\frac{9}{4p^2}\right)^{1/3} \left[ 1 + \frac{0.6213r_s}{21} \ln\left(1 + \frac{21}{r_s(z)}\right) \right] \frac{e^2}{4pe_0r_s(z)e(z)a_B^*(z)} \quad (9)$$

обмінно-кореляційний потенціал, розрахований у апроксимації Хедіна-Лундквіста, де

$$r_s(z) = \left(\frac{4p}{3} a_B^* n(z)\right)^{-1/3} - \text{безрозмірна функція, що}$$

характеризує електронний газ в наноструктурі, по відношенню до ефективного радіусу Бора  $a_B^*(z) = \frac{e(z)}{m(z)a_B}$ ,  $a_B$  - радіус Бора,  $n(z)$  -

концентрація носіїв, що створюють статичний просторовий заряд.

Потенціальна енергія взаємодії електрона  $V_E(z)$  з полями спонтанної та п'єзоелектричної поляризації у межах РТС, визначається як:

$$V_E(z) = \begin{cases} 0, & z < 0, \\ eF_1z; & 0 \leq z < z_1, \\ eF_1z_1 - eF_2z, & z_1 \leq z < z_2, \\ -eF_2z_2 + eF_3z, & z_2 \leq z < z_3, \\ eF_3z_3 - eF_4z, & z_3 \leq z < z_4, \\ -eF_4z_4 + eF_5z, & z_4 \leq z < z_5, \\ 0, & z \geq z_5 \end{cases}, \quad (10)$$

Величини внутрішніх полів  $F_p$ ,  $p = 0..5$ , визначаються з умови неперервності вектора

електричного зміщення  $\bar{D}_p = e^{(p)}\bar{F}_p + \bar{P}_p$  на всіх гетеромежах РТС, тобто:

$$\bar{D}_p = \bar{D}_{p+1}, \quad (11)$$

без урахування наявності у межах РТС вільних зарядів [12-14], що дає умову:

$$\sum_{p=0}^5 F_p d_p = 0. \quad (12)$$

Тоді, зі співвідношень (10) та (11) знаходимо:

$$F_p = \frac{\sum_{k=0}^5 (P_k - P_p) \frac{dk}{e^{(k)}}}{e^{(p)} \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq p}}^5 \frac{dk}{e^{(k)}}}, \quad (13)$$

$d_k$  - товщина відповідного шару РТС.

Величина макроскопічної поляризації  $P^{(p)}$  у виразі (13), яка виникає у довільному  $p$ -му шарі РТС, виражається сумою спонтанної  $P_{SP}^{(p)}$  та п'єзоелектричної  $P_{PZ}^{(p)}$  поляризацій:

$$P^{(p)} = P_{SP}^{(p)} + P_{PZ}^{(p)}, \quad (14)$$

Спонтанна поляризація в гексагональних кристалах з решіткою типу вюрциту задається як:

$$\bar{P}_{SP}^{(p)} = P_{SP}^{(p)} \bar{k}, \quad (15)$$

де  $\bar{k}$  - одиничний вектор вздовж осі  $Oz$ , що визначає орієнтацію кристалографічної осі.

П'єзоелектрична поляризація для трикомпонентного напівпровідникового шару типу  $A_xB_{1-x}N$  у залежності від концентрації  $x$  компоненти  $A$  визначається у лінійній апроксимації:

$$P_{PZ(SP)}^{(p)}(x) = P_{PZ(SP)}^{AN(p)}(h^{(p)}(x)) + (1-x)P_{PZ(SP)}^{BN(p)}(h^{(p)}(x)), \quad (16)$$

де  $P_{PZ(SP)}^{AN(p)}(h^{(p)}(x))$  і  $P_{PZ(SP)}^{BN(p)}(h^{(p)}(x))$  - унаслідок неузгодженості сталих ґраток шарів РТС залежні від величини базальної деформації

$$h^{(p)} = h^{(p)}(x) = \frac{a_{\text{subs}} - a(x)}{a(x)}, \text{ де } a(x) \text{ і } a_{\text{subs}} - \text{сталі}$$

ґраток матеріалу шарів наноструктури та субстрату відповідно, причому:

$$a(x) = 0,31986 - 0,00891x,$$

$$a^{\text{buf}} = \frac{\sum_{p=1}^5 A^{(p)} \frac{d_p}{a^{(p)}}}{\sum_{k=1}^5 \frac{d_p}{(a^{(p)})^2}}; \quad [13], \quad (17)$$

$$A^{(p)} = C_{11}^{(p)} + C_{12}^{(p)} - 2 \frac{(C_{13}^{(p)})^2}{C_{33}^{(p)}}$$

де  $a^{(p)}$  стала ґратки матеріалу,  $d_p$  - товщина,

$C_{11}^{(p)}, C_{12}^{(p)}, C_{13}^{(p)}, C_{33}^{(p)}$  пружні константи  $p$  - шару РТС.

Величина п'єзоелектричної поляризації у межах окремо взятого шару РТС визначається як:

$$P_{PZ}^{(p)} = 2h^{(p)} e_{31}^{(p)} + h_z^{(p)} e_{33}^{(p)} = 2h^{(p)} e_{31}^{(p)} + \left( -\frac{2C_{13}^{(p)}}{C_{33}^{(p)}} h^{(p)} \right) e_{33}^{(p)} = 2h^{(p)} \left( e_{31}^{(p)} - e_{33}^{(p)} \frac{C_{13}^{(p)}}{C_{33}^{(p)}} \right), \quad (18)$$

$$h_z^{(p)} = -\frac{2C_{13}^{(p)}}{C_{33}^{(p)}} h^{(p)}$$

де  $e_{31}^{(p)}, e_{33}^{(p)}$  - п'єзоелектричні константи.

На гетеромежах досліджуваної системи виконуються умови неперервності хвильової функції та потоків її ймовірностей, що є розв'язком першого рівняння самоузгодженої системи (3).

$$\begin{cases} \Psi_n^{(p)}(E_n, z_p) = \Psi_n^{(p+1)}(E_n, z_p) \\ \frac{1}{m^{(p)}(z)} \frac{d\Psi_n^{(p)}(E_n, z)}{dz} \Big|_{z=z_p} = \frac{1}{m^{(p+1)}(z)} \frac{d\Psi_n^{(p+1)}(E_n, z)}{dz} \Big|_{z=z_p} \end{cases} \quad p = 0, 5, \quad (19)$$

а також умови неперервності потенціалу  $j_H(z)$  та вектора електричної індукції:

$$\begin{cases} j_H^{(p)}(z_p) = j_H^{(p+1)}(z_p) \\ e^{(p)}(z) \frac{dj_H^{(p)}(z)}{dz} \Big|_{z=z_p} - e^{(p+1)}(z) \frac{dj_H^{(p+1)}(z)}{dz} \Big|_{z=z_p} = -s(z_p); \end{cases} \quad p = 0, 5, \quad (20)$$

де друга умова враховує наявність поверхневих зарядів на гетеромежах наносистеми.

При цьому вважається, що для потенціалу  $j_H(z)$  за межами РТС виконуються умови його зникнення:

$$f_H(z) \Big|_{z \rightarrow 0} \rightarrow 0; f_H(z) \Big|_{z \rightarrow z_5} \rightarrow 0, \quad (21)$$

Розв'язки самоузгодженої системи (3) будемо шукати на рівномірній сітці [16]:

$$\bar{w} = \left\{ z_s = sh, s = 0, 1, \dots, N, h = \frac{l}{N} \right\}, \quad (22)$$

де  $l = d_1 + d_2 + d_3 + d_4 + d_5 = z_5$  - сумарна товщина

РТС.

Згідно методу скінченних різниць перша та друга похідні апроксимуються як [16] (для зручності опущено індекс "n"):

$$\frac{d\Psi^{(s)}(z)}{dz} \Big|_{z=z_s} = \frac{\Psi_{s+1} - \Psi_s}{h};$$

$$\frac{d^2\Psi^{(s)}(z)}{dz^2} \Big|_{z=z_s} = \frac{\Psi_{s+1} - 2\Psi_s + \Psi_{s-1}}{h^2}, \quad (23)$$

Крім того, для хвильових функцій мають виконуватися умови періодичності, аналогічні умовам Борна-Кармана, що дає умову:

$$\Psi_0 = \Psi_N; \Psi_1 = \Psi_{N+1}, \quad (24)$$

Тоді хвильові функції електрона визначаються розв'язками матричного рівняння:

$$\sum_{r=1}^N A_{sr} \Psi_s = f_s, ; \Psi_s = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \\ \Psi_s \\ \mathbf{M} \\ \Psi_N \end{pmatrix}; \quad (25)$$

$$f_s = \begin{pmatrix} c_s h \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \mathbf{M} \\ 0 \end{pmatrix}; c_s = \frac{\sqrt{2m_1(\Delta E_C(z_s) - E)}}{h}$$

де  $A_{sr}$  ( $s = \overline{1...N}, r = \overline{1...N}$ ) - матриця, для

$$\text{елементів якої: } A_{sr} = \begin{cases} 1, & r = s - 1, \\ -\left(1 + \frac{m_s}{m_{s+1}}\right), & r = s, \\ \frac{m_s}{m_{s+1}}, & r = s + 1, \\ 0, & \text{решта елементів} \end{cases},$$

якщо вузли сітки  $z_s$  співпадають з гетеромежами

$$\sum_{r=1}^N B_{sr} f_s = F_s, ; f_s = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ f_s \\ \mathbf{M} \\ f_N \end{pmatrix}; f_0 = f_{N+1} = 0; F_s = \begin{pmatrix} -r_1 h \\ P_2 - P_1 \\ \mathbf{M} \\ -r_{s-1} h \\ P_s - P_{s-1} \\ \mathbf{M} \\ -r_N h \\ P_{N+1} - P_N \end{pmatrix}, \quad (28)$$

$$\text{де } B_{sr} \text{ (} s = \overline{1...N}, r = \overline{1...N} \text{)} -- \text{ матриця, для елементів якої: } B_{sr} = \begin{cases} e^{(s-1)}, & r = s - 1, \\ -(e^{(s-1)} + e^{(s)}), & r = s, \\ e^{(s)}, & r = s + 1, \\ 0, & \text{решта елементів} \end{cases}, \text{ якщо вузли сітки}$$

$$\text{РТС і } A_{sr} = \begin{cases} 1, & r = s - 1, \\ (k_s^2 - c_s^2)h^2 - 2, & r = s \\ -1, & r = s + 1 \\ 0, & \text{решта елементів} \end{cases} \text{ в протилежному}$$

випадку.

Стационарний енергетичний спектр  $E_n^{(s)}$  електрона визначається із дисперсійного рівняння:

$$\det |A_{NN} - I I| = 0, \quad (26)$$

Тобто, для кожного власного числа  $I_n$  матриці  $A_{NN}$  значення енергії дискретного спектру визначається як:

$$E_n^{(s)} = \frac{(I_n + 2)h^2}{2m_s h^2} + \frac{c_s^2 h^2}{2m_s}, \quad (27)$$

де  $n = 1, 2, \dots$  - номер енергетичного рівня стаціонарного електронного спектру.

Аналогічно знаходимо, що розв'язки рівняння Пуассона з урахуванням граничних умов для нього (20) та при апроксимації похідних згідно (23), визначаються розв'язками матричного рівняння:

$$z_s \text{ співпадають з гетеромежами РТС і } B_{sr} = \begin{cases} e^{(s)}, & r = s-1, \\ -(e^{(s)} + e^{(s+1)}), & r = s \\ e^{(s+1)}, & r = s+1 \\ 0, & \text{решта елементів} \end{cases} \text{ в протилежному випадку.}$$

У співвідношенні (28):

$$r_s = r(z) = s(z_s) d(z_{s+1} - z_s) + e(N_D^+ - n(z_s)) = (P(z)|_{z=z_s+0} - P(z)|_{z=z_s-0}) / h + e(N_D^+ - n(z_s)) = (P_{s+1} - P_s) / h + e(N_D^+ - n(z_s)); N_D^+ = \frac{N_D}{1 + 2 \exp\left(\frac{E_F - E_n^{(s)}}{kT}\right)}; \quad (29)$$

$$n(z_s) = n(E, z_s) = \sum_m n_0 \left| \Psi(E_n^{(s)}, z_s) \right|^2 = \frac{m_p k_B T}{p h^2} \sum_m \left| \Psi(E_n^{(s)}, z_s) \right|^2 \ln \left| 1 + \exp\left(\frac{E_F - E_n^{(s)}}{k_B T}\right) \right|,$$

$E_F$  - рівень Фермі матеріалу шарів РТС,  $N_D$ ,  $N_D^+$  - концентрації донорних та іонізованих донорних домішок відповідно,  $n_0$  - концентрація вільних носіїв заряду в РТС.

Тепер самоузгоджений розв'язок системи рівнянь Шредінгера та Пуассона (3) знаходиться методом послідовних  $l$  ітерацій за схемою:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{1}{m(z)} \frac{\partial \Psi_n^{(l+1)}(z)}{\partial z} \right) + V^{(l+1)}(z) \Psi_n^{(l+1)}(z) = E_n^{(l+1)} \Psi_n^{(l+1)}(z); \\ \frac{\partial}{\partial z} \left( e(z) \frac{\partial f_H^{(l)}(z)}{\partial z} \right) = -r^{(l)}(z) \end{cases}, \quad (30)$$

де ефективний потенціал в першому порядку ітерацій розраховується як:

$$V^{(l)}(z) = \Delta E_C(z) + V_E(z). \quad (31)$$

Точність обчислень за схемою (30) задається очевидними умовами:

$$\begin{aligned} \frac{\left| \Psi_n^{(l+1)}(z) \right|^2 - \left| \Psi_n^{(l)}(z) \right|^2}{\left| \Psi_n^{(l)}(z) \right|^2} &\ll 1; \\ \frac{\left| f_H^{(l)}(z) - f_H^{(l-1)}(z) \right|}{f_H^{(l)}(z)} &\ll 1 \end{aligned}, \quad (32)$$

В безпосередніх розрахунках точність обчислень згідно умов (32) уважалась рівною  $10^{-6}$ , що забезпечувалось 7-10 ітераціями згідно зі схемою (30).

## II. Обговорення результатів

На основі розвиненої вище теорії виконувався

розрахунок стаціонарного енергетичного спектру електрона  $E_n$  та його хвильових функцій  $\Psi_n(E_n, z)$  у РТС, а також ефективного потенціалу  $V(z)$  та його складових  $\Delta E_C(z)$ ,  $V_H(z)$ ,  $V_{ex}(z)$ ,  $V_E(z)$ .

Безпосередні розрахунки виконувались для експериментально реалізованої РТС, що слугувала каскадом ККД [8]. Геометричні параметри РТС такі: товщини потенціальних бар'єрів:  $\Delta_1 = 2$  нм;  $\Delta_2 = 1$  нм;  $\Delta_3 = 1$  нм, ширини потенціальних ям:  $d_1 = 2.08$  нм;  $d_2 = 15$  нм. Фізичні параметри РТС такі: ефективні маси електрона:

$$m_0 = m(\text{GaN}) = 0,186 m_e;$$

$$m_1 = m(\text{AlN}) = 0,322 m_e;$$

$$m_2 = m(\text{Al}_{0,58}\text{Ga}_{0,42}\text{N}) = 0,265 m_e;$$

діелектричні проникності:

$$e_1 = e(\text{GaN}) = 10;$$

$$e_2 = e(\text{AlN}) = 8,5; \quad ;$$

$$e_3 = e(\text{Al}_{0,58}\text{Ga}_{0,42}\text{N}) = 9,13$$

концентрація донорних домішок:

$$N_D = 6 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3};$$

п'єзоелектричні константи (Кл/м<sup>2</sup>):

$$e_{31}^{(0)} = e_{31}(\text{GaN}) = -0,49; e_{31}^{(1)} = e_{31}(\text{AlN}) = -0,60;$$

$$e_{31}^{(2)} = e_{31}(\text{Al}_{0,58}\text{Ga}_{0,42}\text{N}) = -0,554;$$

$$e_{33}^{(0)} = e_{33}(\text{GaN}) = 0,73; e_{33}^{(1)} = e_{33}(\text{AlN}) = 1,46;$$

$$e_{33}^{(2)} = e_{33}(\text{Al}_{0,58}\text{Ga}_{0,42}\text{N}) = 1,327;$$

пружні константи (ГПа):

$$C_{11}^{(0)} = C_{11}(\text{GaN}) = 374; C_{11}^{(1)} = C_{11}(\text{AlN}) = 345;$$

$$C_{11}^{(2)} = C_{11}(\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}) = 357,18;$$

$$C_{12}^{(0)} = C_{12}(\text{GaN}) = 106; C_{12}^{(1)} = C_{12}(\text{AlN}) = 125;$$

$$C_{12}^{(2)} = C_{12}(\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}) = 117,02;$$

$$C_{13}^{(0)} = C_{13}(\text{GaN}) = 70; C_{13}^{(1)} = C_{13}(\text{AlN}) = 120;$$

$$C_{13}^{(2)} = C_{13}(\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}) = 99,00;$$

$$C_{33}^{(0)} = C_{33}(\text{GaN}) = 397; C_{33}^{(1)} = C_{33}(\text{AlN}) = 395;$$

$$C_{33}^{(2)} = C_{33}(\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}) = 388,28.$$

спонтанна поляризація ( Кл/м<sup>2</sup>):

$$P^{SP(1)} = P^{SP}(\text{GaN}) = -0,029;$$

$$P^{SP(2)} = P^{SP}(\text{AlN}) = -0,081;$$

$$P^{SP(3)} = P^{SP}(\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}) = -0,059.$$

На рис. 2 зображено енергетичну схему одного каскаду ККД, розрахунок якої виконувався без урахування електричного поля спонтанної та п'єзоелектричної поляризації згідно зі співвідношеннями (5)-(7). З рисунка (2) видно, що у порівнянні з каскадами ККД, що працюють у середньому та дальньому інфрачервоному діапазонах [1, 2], глибини потенціальних ям та висоти потенціальних бар'єрів є набагато більшими, що становить значні перспективи у варіюванні робочими характеристиками ККД зміною параметрів геометричного дизайну каскаду ККД [4, 5].

Розрахунки складової ефективного потенціалу, визначеного п'єзоелектричною та спонтанною поляризаціями виконувались за співвідношеннями (4), (8)-(10). Результати розрахунків у залежності від величини  $z$  подано на рис. 3. З рис. 3 видно, що внутрішні електричні поля, які визначаються п'єзоелектричною та спонтанною поляризаціями є співмірними зі значеннями висот та глибин

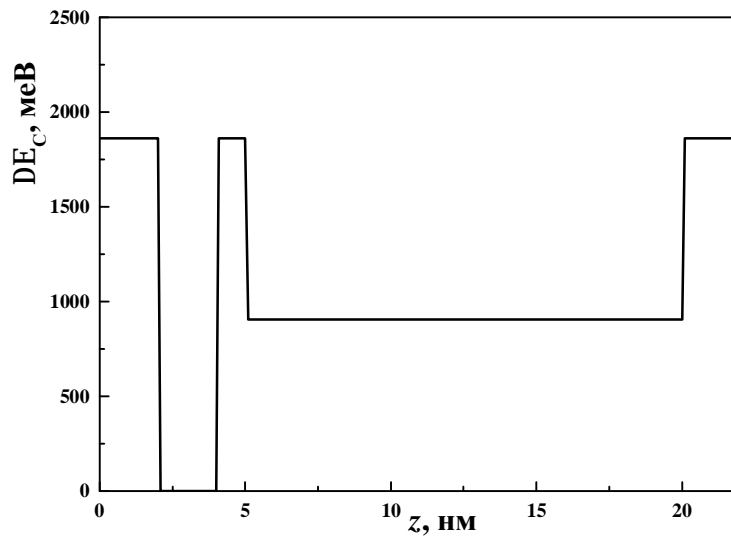


Рис. 2. Енергетична схема одного каскаду ККД без урахування електричного поля спонтанної та п'єзоелектричної поляризації.

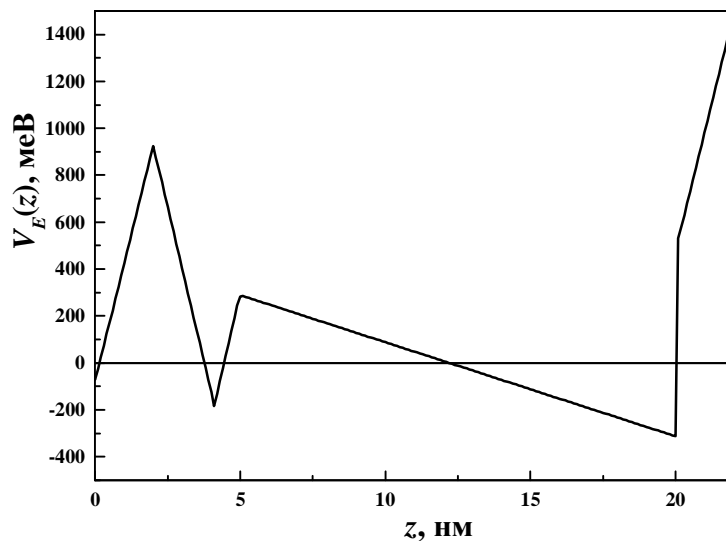
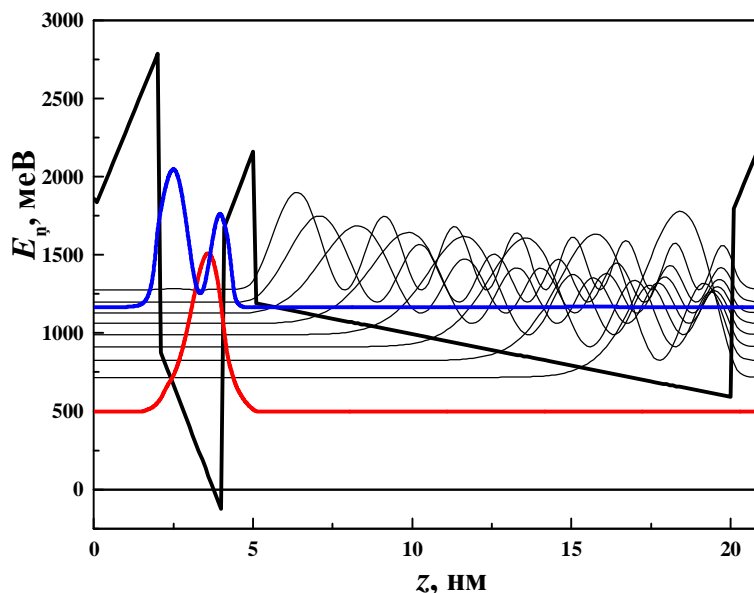


Рис. 3. Залежність від  $z$  складової ефективного потенціалу, визначеного п'єзоелектричною та спонтанною поляризаціями.



**Рис. 4.** Енергетична структура каскаду ККД з вказаними енергетичними рівнями стаціонарних станів електрона та відповідними розподілами ймовірності  $|\Psi(E_n, z)|^2$  його знаходження у межах РТС.

потенціальних ям на бар'єрів РТС відповідно, що як буде видно далі, є причиною їх суттєвого внеску у сумарний ефективний потенціал.

На рис. 4 подано результати розрахунку від величини  $z$  сумарного ефективного потенціалу для досліджуваної РТС. З рисунка видно, що урахування ефектів, за які відповідають складові ефективного потенціалу згідно співвідношення (4), як було вказано вище, приводить до суттєвої деформації вихідного потенціалу. Слід зауважити, що розглядуваний ефект є безпосереднім наслідком фізичних властивостей матеріалу шарів потенціальних ям та бар'єрів досліджуваної РТС й має визначальне значення для процесу детектування електромагнітних хвиль ККД.

Також на рис. 4 подано розраховані значення резонансних енергій електрона в досліджуваній РТС,

що віднесені до шкали енергій (зліва на рисунку) та відповідні їм розподіли ймовірності знаходження електрона у межах наносистему  $|\Psi(E_n, z)|^2$  (приведені до масштабу шкали енергій). Безпосередні значення резонансних енергій та інформація щодо локалізації електрона у межах РТС для відповідного енергетичного стану подано у табл. 1. З рис. 4 видно, що розрахована величина детектованої енергії, яка відповідає енергетичному переходу між електронними станами, локалізованими у активній зоні ККД є також:

$$\Omega = \Omega^{(теор)} = E_8 - E_1 = 670,7 \text{ меВ.}$$

Розраховане значення величини детектованої енергії добре корелює з експериментом, оскільки відрізняється від експериментально отриманого значення  $\Omega^{(експ)} = 650,0 \text{ меВ}$  не більше ніж на 3,1 %.

**Таблиця 1**

Значення енергій дискретного спектру електрона з закритій РТС каскаду ККД та їх локалізація

Значення енергій (меВ)	Локалізація
$E_1 = 496,2$	активна зона
$E_2 = 717,4$	екстрактор
$E_3 = 824,7$	екстрактор
$E_4 = 912,5$	екстрактор
$E_5 = 990,1$	екстрактор
$E_6 = 1061,1$	екстрактор
$E_7 = 1128,4$	екстрактор
$E_8 = 1166,9$	активна зона
$E_9 = 1197,6$	екстрактор
$E_{10} = 1276,1$	екстрактор

## Висновки

На основі знайдених самоузгоджених розв'язків системи рівнянь Шредінгера та Пуассона з урахуванням внеску п'єзоелектричної та спонтанної поляризації розвинена квантово-механічна теорія стаціонарних електронних станів у плоскій РТС як активній зоні ККД.

Для експериментально досліджуваної РТС на основі розвиненої теорії виконано самоузгоджений розрахунок електронного потенціального профілю, стаціонарного енергетичного спектру та величини детектованої енергії. Показано, що результати розрахунків добре узгоджуються з експериментом.



**Бойко І.В.** - кандидат фізико-математичних наук, доцент, доцент кафедри програмної інженерії;  
**Ткач М.В.** – професор, доктор фізико-математичних наук, завідувач кафедри теоретичної фізики та комп'ютерного моделювання;

**Сети Ю.О.** – професор, доктор фізико-математичних наук, професор кафедри теоретичної фізики та комп'ютерного моделювання.

- [1] D. Hofstetter, F.R. Giorgetta, E. Baumann, Q. Yang, C. Manz, and K. Kohler, Appl. Phys. Lett. 93, 221106 (2008).
- [2] A. Harrer, B. Schwarz, R. Gansch, P. Reininger, H. Detz, T. Zederbauer, A. Maxwell Andrews, W. Schrenk, and G. Strasser, Appl. Phys. Lett. 105, 171112 (2014).
- [3] P. Reininger, T. Zederbauer, B. Schwarz, H. Detz, D. MacFarland, Appl. Phys. Lett. 107, 081107 (2015).
- [4] I.V. Boyko, Ukr. J. Phys. 61(1), 66 (2016).
- [5] M.V. Tkach, Ju.O. Seti, I. V. Boyko, and O.M. Voitsekhivska, Condens. Matter Phys. 16, 33701 (2013).
- [6] Ju. O. Seti, M. V. Tkach, M. V. Pan'kiv, Condens. J. Phys. Stud. 20(1/2), 1702 (2016).
- [7] S. Sakr, E. Giraud, A. Dussaigne, M. Tchernycheva, N. Grandjean, and F. H. Julien, Appl. Phys. Lett. 100, 181103 (2012).
- [8] S. Sakr, E. Giraud, M. Tchernycheva, N. Isac, P. Quach, E. Warde, N. Grandjean, and F. H. Julien, Appl. Phys. Lett. 101, 251101 (2012).
- [9] S. Sakr, P. Crozat, D. Gacemi, Y. Kotsar, A. Pesach, P. Quach<sup>1</sup>, N. Isac, M. Tchernycheva, Appl. Phys. Lett. 102, 011135 (2013).
- [10] Y. Qu, S. L. Ban, J. Appl. Phys. 110, 013722 (2011).
- [11] Z. Gu, S. L. Ban, D. D. Jiang, and Y. Qu, Condens. J. Appl. Phys. 121, 035703 (2017).
- [12] B.K. Ridley, W.J. Schaff and L.F. Eastman, J. Appl. Phys. 94, 3972 (2003).
- [13] V. Fiorentini, F. Bernardini, O. Ambacher, Appl. Phys. Lett. 80, 1204 (2002).
- [14] O. Ambacher, J. Majewski, C. Miskys, A. Link, M. Hermann, M. Eickhoff, M. Stutzmann, F. Bernardini, V. Fiorentini, V. Tilak, J. Phys.: Condens. Matter. 14(13), 3399 (2002).
- [15] S. Saha, J. Kumar, J. Comput. Electron. 15(4), 1531 (2016).
- [16] A.A. Samarskii, The Theory of Difference Schemes (Marcel Dekker, New York, 2001).

I.V. Boyko<sup>1</sup>, M.V. Tkach<sup>2</sup>, Ju.O. Seti<sup>2</sup>

## Self-Consistent Calculation of Potential Profile of GaN/AlN Resonance Tunnelling Structures

<sup>1</sup>Ternopil Ivan Pul'uj National Technical University, Ruska str., 56, Ternopol, 46001, e-mail: [boyko.i.v.theory@gmail.com](mailto:boyko.i.v.theory@gmail.com)

<sup>2</sup>Chernivtsi National University, Kotsubynsky str., 2, Chernivtsi, 58012, e-mail: [ktf@chnu.edu.ua](mailto:ktf@chnu.edu.ua)

For resonant tunneling structure with GaN – potential wells and AlN – potential barriers, calculation of internal fields caused by piezoelectric and spontaneous polarization was carried.

In the model the effective mass of an electron and a dielectric continuum model using finite difference method self-consistent solutions of the Schrödinger and Poisson system of equations taking into account the contribution of piezoelectric and spontaneous polarizations was found.

Based on the found solutions of the Schrödinger and Poisson system of equations for resonance tunneling structure, which functioned as a cascade experimentally realized a quantum cascade detector, calculation of the potential profile and the electron energy spectrum was carried. It was found, that calculated value of detected energy is different from the experimentally obtained not more than 3 %.

**Keywords:** quantum cascade detector, resonance tunnel structure, piezoelectric polarization, spontaneous polarization, potential profile.