

УДК 538.958

Демедюк Р.О., Мезєнцева О.А.¹ кандидат фіз.-мат. наук, доцент кафедри математики, фізики та інформатики, ДВНЗ «ДДПУ»e-mail: demediuk.roman@gmail.com, ORCID 0009-0000-6081-3773² здобовачка першого (бакалаврського) РВО за ОП «Середня освіта (Фізика)», ДВНЗ «ДДПУ»e-mail: mezencevaolha@gmail.com, ORCID 0009-0005-3492-5399

ПЕРЕБУДОВА ЕНЕРГЕТИЧНИХ РІВНІВ В ПОДВІЙНІЙ КВАНТОВІЙ ЯМІ ВНАСЛІДОК ІОНІЗАЦІЇ ДОНОРІВ

У роботі досліджено вплив температурної іонізації донорних домішок дельта-шару на енергетичні рівні в кремнієвій подвійній квантовій ямі з $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ -бар'єрами. Показано, що перерозподіл зарядів змінює форму потенціального профілю, що впливає на розташування та зазор між рівнями розмірного квантування. Результати можуть бути використані для частотного налаштування терагерцових оптоелектронних пристроїв.

Ключові слова: квантова яма, дельта-легкування, терагерцове випромінювання, кремнієві наноструктури, іонізація, оптичні переходи.

Вступ

Постановка проблеми. Розвиток нанотехнологій відкриває широкі можливості для керування енергетичними рівнями та зазором між ними в гетероструктурах, зокрема у квантових ямах (КЯ). Це дозволяє регулювати робочу частоту оптоелектронних пристроїв, виготовлених на основі таких структур. Із впровадженням формули $\Delta E_{ij} = E_j - E_i = h\nu_{ij}$ [1,2] М. Планком та А. Ейнштейном, стало очевидно, що світло випромінюється, зокрема, внаслідок переходів між енергетичними рівнями. Ще у 60-х роках, М.С. Соскін наголошував на потребі керування частотою генерації лазера, що, по суті, зводиться до керування цими рівнями [3]. Таким чином, проблема випромінювання світла була перетворена у задачу зміни різниці енергії між енергетичними рівнями.

Незважаючи на те, що від тоді пройшло досить багато часу, задача керування енергетичними рівнями у квантових структурах з метою регулювання випромінювання/поглинання залишається актуальною.

У попередніх дослідженнях нами було продемонстровано можливість зміни енергетичного зазору між першими рівнями розмірного квантування в дельта-легованих (в центр або в край) КЯ [4]. Також було показано, що ця зміна відповідає зсуву частоти приблизно кілька терагерц (ТГц). В даній статті пропонується проаналізувати аналогічний механізм у подвійній КЯ, при дельта-легуванні в край однієї з цих КЯ. Очікується, що така геометрія гетероструктури може збільшити діапазон регулювання.

Метою статті є кількісна та якісна оцінка можливості керування енергетичними рівнями в подвійних КЯ шляхом іонізації донорів дельта-шару, розташованого на краю однієї з КЯ для розширення діапазону зміни частоти випромінювання/поглинання оптоелектронних пристроїв на основі таких гетеоструктур.

Основна частина

В роботі [4] для КЯ, дельта-легованої мілкою домішкою n-типу, був описаний наступний механізм: зі зростанням температури підвищується ступінь іонізації домішок, що, у свою чергу, призводить до збільшення концентрації електронів на рівнях розмірного квантування в КЯ та іонізованих донорів у дельта-шарі. Такий перерозподіл зарядів змінює потенціальний профіль, зокрема, утворює додаткове V -подібне збурення на фоні початкового прямокутного профілю (при $T = 0$ К). Зі зростанням глибини цього збурення в ньому формується більше квантових рівнів, а завдяки його меншій ширині (порівняно з прямокутною КЯ) зростає енергетичний зазор між цими рівнями. Основну увагу приділено першим рівням, оскільки вони найбільш заселені електронами.

Об'єктом дослідження є гетероструктура, докладно описана в [5]: Si-КЯ з $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ -бар'єрами та Р-дельта-шаром. Для досягнення заявленої мети застосовано самоузгоджений чисельний метод, який передбачає ітеративне розв'язання рівнянь Шредінгера, Пуассона та електронейтральності.

Одним з ключових параметрів є енергія зв'язку домішки (ЕЗД). У більшості робіт для легованих гетероструктур ЕЗД приймається сталою, рівною значенню в об'ємному матеріалі. У нашому випадку це припущення не є коректним, тому у розрахунках було використано оцінку ЕЗД за методом, описаним у [4], як складову ітераційної процедури.

Рівняння Шредінгера зводиться до одновимірної задачі на власні значення для гамільтоніана:

$$H_0 = -\frac{\hbar}{2m_{\perp}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + e\varphi(z) + V(z),$$

де перший доданок описує кінетичною енергію, де z – напрямок росту гетероструктури, $m_{\perp}$ – ефективна маса електрона в цьому напрямку. Другий доданок – це потенціал Хартрі – V -подібне збурення профілю, що створюється внаслідок перерозподілу зарядів в гетероструктурі. Третій доданок $V(z)$ описує прямокутний потенціал гетероструктури:

$$V(z) = \begin{cases} V_b, & |z/L| \geq 0,5 \\ 0, & |z/L| < 0,5 \end{cases}, \text{ де } L - \text{ширина гетероструктури.}$$

Рівень Фермі визначається з рівняння електронейтральності:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} N^{\pm}(z) dz = 0,$$

де $N^{\pm}(z)$ – об'ємна концентрація заряду. Потенціал Хартрі обчислюється шляхом прямого інтегрування рівняння Пуассона:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = \frac{e}{\varepsilon \varepsilon_0} N^{\pm}(z)$$

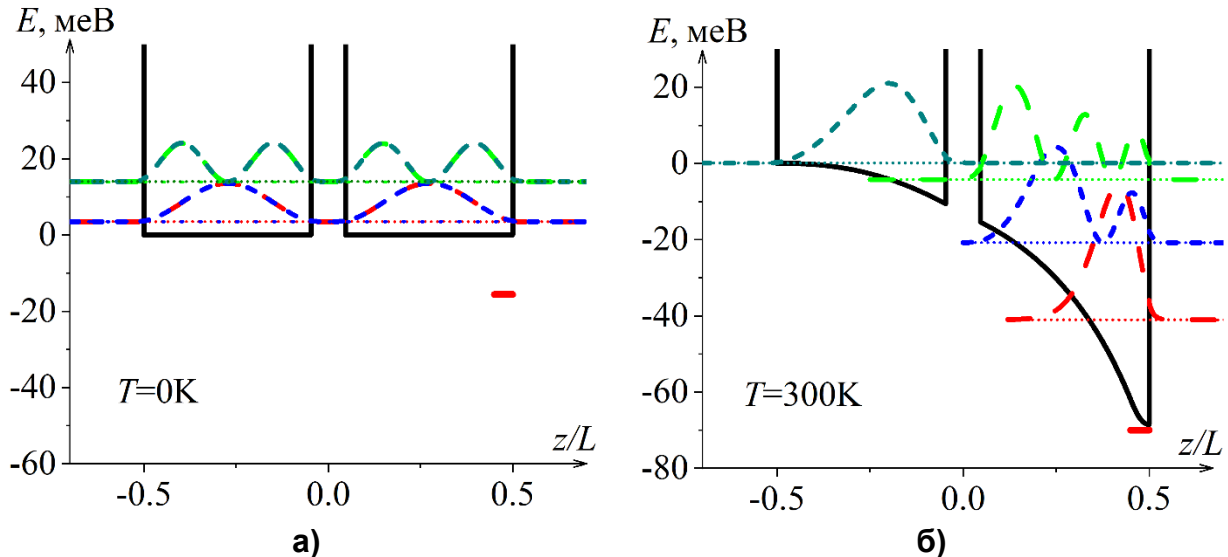


Рис. 1. Потенціальний профіль (чорна суцільна лінія), положення перших чотирьох рівнів розмірного квантування (точкові лінії) та квадрати відповідних хвильових функцій (пунктирні лінії) для температур: а) 0 K; б) 300 K.

Рисунок 1 демонструє отримані результати: потенціальний профіль, положення перших чотирьох рівнів розмірного квантування, а також квадрати відповідних хвильових функцій для двох значень температури. Із підвищенням температури зростає ступінь іонізації донорних домішок (табл. 1, N_D), що призводить до збільшення концентрації електронів у квантових ямах та іонізованих донорів у дельта-шарі. Такий перерозподіл зарядів модифікує потенціальний профіль структури – на фоні початкового прямокутного профілю (при $T = 0\text{ K}$) виникає додаткове V -подібне збурення. Із поглибленням цього збурення в ньому формується більше квантових рівнів, а його відносно мала ширина спричиняє збільшення енергетичного зазору між ними. Основну увагу зосереджено на перших двох рівнях, які мають найбільшу ймовірність заселення електронами.

Отримані результати свідчать (рис. 1, табл. 1), що температурна іонізація донорних домішок у дельта-шарі забезпечує ефективне керування квантовими рівнями в кремнієвій подвійній квантовій ямі з $\text{Si}_{0,8}\text{Ge}_{0,2}$ -бар'єрами. Зі зростанням температури підвищується концентрація іонізованих донорів, що призводить до появи додаткового V -подібного збурення в потенціальному профілі структури. Це збурення зумовлює зміщення енергетичних рівнів розмірного квантування та зміну зазору між ними.

Таблиця 1

Залежність енергетичного зазору між парами 2-1 та 3-2 рівнів розмірного квантування (ΔE_{21} , ΔE_{32}), ЕЗД (E_δ) та ступеня іонізації донорної домішки (N_D) від температури.

	ΔE_{21} , меВ	ΔE_{32} , меВ	E_δ	N_D , %
$T = 0\text{K}$	0.0	10.4	19.1	0
$T = 50\text{K}$	4.4	6.1	20.9	6
$T = 100\text{K}$	11.5	0.9	24.1	21
$T = 150\text{K}$	13.7	6.9	26.1	36
$T = 200\text{K}$	16.0	12.4	27.3	49
$T = 250\text{K}$	18.2	16.7	27.8	59
$T = 300\text{K}$	20.2	17.1	28.9	66

Для перших двох квантових підзон такий енергетичний зазор змінюється в межах приблизно 20 меВ (табл. 1, ΔE_{21}) у досліджуваному температурному діапазоні, що відповідає зсуву частоти на ~ 5 ТГц. Цікаву тенденцію виявлено для зміни енергетичного зазору між другим і третім енергетичними рівнями гетероструктури (табл. 1, ΔE_{32}). Спочатку цей зазор зменшується, однак приблизно при температурі 100К починає зростати. Зі збільшенням температури від 0 К зростає потенціал Хартрі. Перший енергетичний рівень майже одразу (при низьких температурах) потрапляє до V-подібного збурення, виштовхуючи звідти другий рівень через кулонівську взаємодію електронів. Однак при подальшому підвищенні температури (між 100 і 150 К) другий рівень також опиняється у V-подібній частині потенціалу. Із цього моменту енергетичний зазор ΔE_{32} починає зростати зі збільшенням температури. Щодо температурної залежності ЕЗД (табл. 1, E_δ), спостерігається тенденція до її зростання з підвищенням температури. Така поведінка узгоджується з особливостями зміни потенціального профілю структури, зумовленого перерозподілом зарядів. Виявлений механізм забезпечує можливість налаштування частотних характеристик оптоелектронних пристроїв без необхідності модифікації геометрії гетероструктури.

Висновки

У роботі продемонстровано, що температурна іонізація донорних домішок дельта-шару дозволяє ефективно керувати енергетичними рівнями у кремнієвій подвійній квантовій ямі з $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ -бар'єрами. Показано, що перерозподіл зарядів у структурі змінює її потенціальний профіль, зокрема формуючи V-подібне збурення, що значно впливає на положення квантових рівнів. У результаті енергетичний зазор між першими рівнями змінюється на ~ 20 меВ, що відповідає частотному зсуву близько 5 ТГц. Встановлено також складну нелінійну поведінку зазору між другим і третім рівнями, яка пояснюється кулонівською взаємодією електронів.

Зростання енергії зв'язку домішок з температурою, виявлене у моделюванні, узгоджується з перерозподілом зарядів та глибиною потенціального збурення. Отримані результати свідчать про те, що за рахунок температурного або електричного керування іонізацією можна налаштовувати спектральні характеристики оптоелектронних пристроїв без зміни геометрії гетероструктури. Це відкриває перспективи для розробки спектрально керованих терагерцових приладів на основі кремнієвих наноструктур.

Література

1. M. Planck. On the Theory of the Energy Distribution Law of the Normal Spectrum. *Verh. Deut. Phys. Ges.* – 1900. – Vol. 2. – p. 237.
2. A. Einstein. Concerning an Heuristic Point of View Toward the Emission and Transformation of Light. *Ann. Phys. Ser.* – 1905. – Vol. 17. – p. 132.
https://icg.isy.liu.se/en/phd-courses/quantum_foundations/references/Einstein1905b.pdf
3. М.С. Соскін, Блискучий початок та прекрасне продовження (спогади колеги до 80-річчя академіка М.С. Бродина). *Укр. фіз. журн.* – 2011. – Vol. 56. – p. 1141-1144.
<http://archive.ujp.bitp.kiev.ua/files/journals/56/10/561023pu.pdf>
4. V. Tulupenko, C. A. Duque, R. Demediuk, Ya. Belichenko, C.M. Duque, V. Akimov, V. Poroshin, O. Fomina. On the possibility of tuning the energy separation between space-quantized levels in a quantum well *Philos. Mag. Lett.* – 2013. – Vol. 93. – p. 42.
<http://dx.doi.org/10.1080/09500839.2012.729959>
5. Демедюк, Р., Мезенцева О.А. (2025). Вплив іонізації донорів на перебудову енергетичних рівнів розмірного квантування в подвійній квантовій ямі, Харківський природничий форум : VIII міжнар. конф. молодих учених, Харків, 14-15 трав. 2025 р. : зб. наук. пр. / Харків нац. пед. ун-т ім. Г. С. Сковороди, 2025, С. 292-295.
<https://dspace.hnpu.edu.ua/handle/123456789/18916>

Roman O. Demediuk, Olha A. Miezientseva

Donbas State Pedagogical University, Sloviansk, Ukraine

RESTRUCTURING OF ENERGY LEVELS IN A DOUBLE QUANTUM WELL AS A RESULT OF DONOR IONIZATION

The paper investigates the effect of temperature ionization of delta-layer donor impurities on energy levels in a silicon double quantum well with $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ barriers. It is shown that the redistribution of charges changes the potential profile, which affects the location and gap between the size-quantized levels. The results can be used for frequency tuning of terahertz optoelectronic devices.

Keywords: *quantum well, delta-doping, terahertz radiation, silicon nanostructures, ionization, optical transitions.*