

DIPLOMAMUNKA SZUPPLEMENTUM

Rácsillesztett félvezető heteroátmenetek energia-
sávszerkezetének vizsgálata

Boda Dezső

Tartalom

Tartalom.....	2
Bevezető.....	3
1. Tiszta GaAs és ZnSe.....	5
2. Atomi rétegek keverése az interface-nél.....	7
3. Heterovalens (001) GaAs/ZnSe interface.....	11
Irodalom.....	19

Bevezető

Diplomamunkámban a GaAs/ZnSe rácsillesztett félvezető heteroátmenet sávszakadásainak (VBO,CBO) meghatározását tűztük ki célul. A dolgozatban megtalálható a félvezető-átmenetek elméletének áttekintése, a potenciál eltolódás módszerének az ismertetése és egy lokális pszeudopotenciálon alapuló sávszámítási módszer részletes leírása. Közöltem ezenkívül egy számolási eredményt tiszta GaAs-ra és ZnSe-re; a számolást a lapcentrált köbös rács kétatomos elemi cellájára vonatkozóan végeztem el. Az eredményt értékelve kitűnik, hogy a valenciasáv szélessége (12-14 eV) és az ágak viselkedése megfelelő; a tilos sávok szélessége (3.3 eV ill. 7.4 eV) viszont jelentősen eltér az irodalmi értéktől (1.4 eV ill. 2.6 eV) [12].

Mivel alkalmam nyíltott folytatni a munkát attól a ponttól, ahol a diplomamunka befejeződött, az azóta kapott eredményeket ebben a Kiegészítésben közzétehetem.

Végeztem egy számolást az interface-hez konstruált 12 atomos tetragonális cellára írt program segítségével a GaAs és a ZnSe energiaszintjeire a Γ pontban. Az így kapott tilos sáv szélesség már meglehetősen egyezést mutat az irodalmi értékekkel. Ez az 1. fejezetben található.

Mivel a GaAs/ZnSe heterovalens átmenet, ezért a legegyszerűbb modell esetében az interface-nél töltés halmozódik fel, ami instabillá teszi a rendszert. Ezen kérdésnek az elemzése és a probléma kiküszöbölésének egy lehetséges módja található a 2. fejezetben.

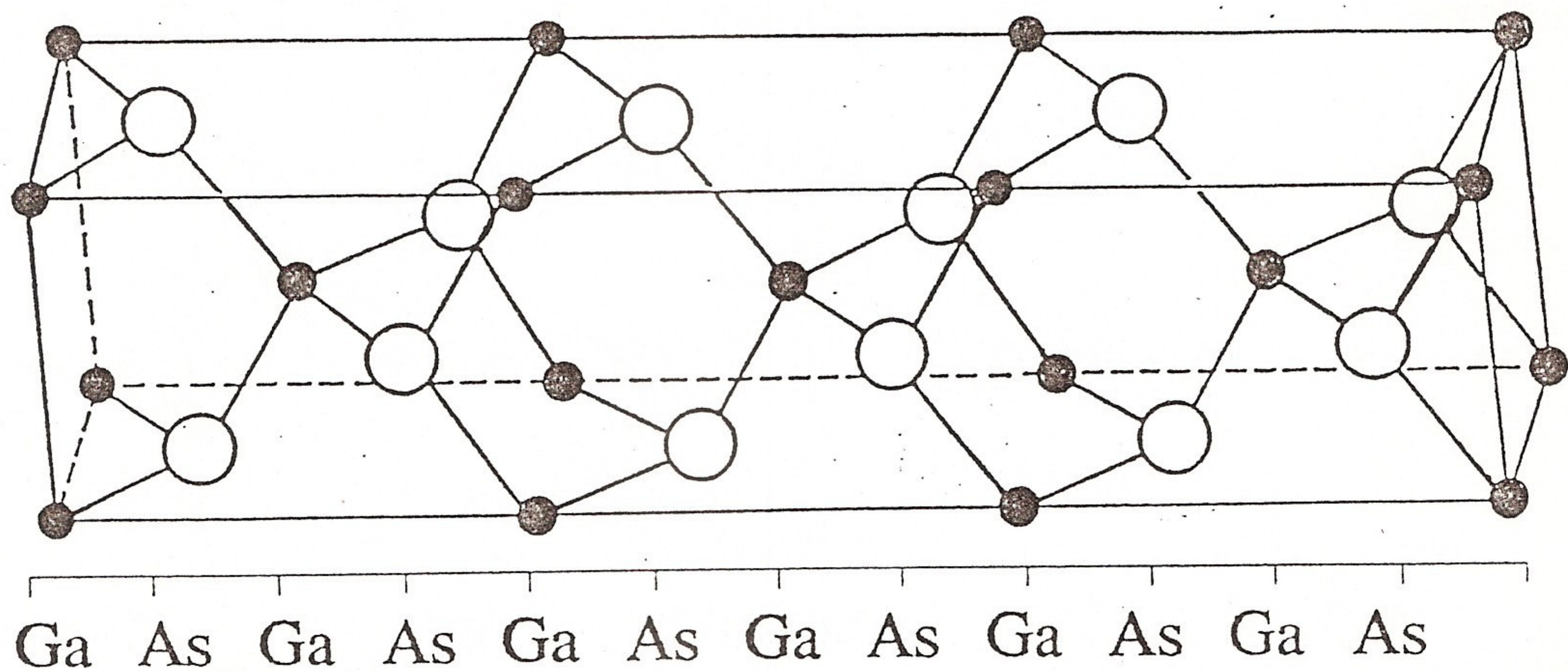
A 3. fejezetben a síkbeli és makroszkopikus átlagok, valamint a potenciál eltolódásra és a VBO-ra kapott eredmények találhatók a (001) irányban.



1. FEJEZET

TISZTA GAAS ÉS ZNSE

A Diplomamunka 4. fejezetében leírt sávszámitási módszerrel az 1. ábrán látható cellával számolást végeztem tiszta GaAs-ra és tiszta ZnSe-re. Mivel mindkét anyagnál a valenciasáv teteje és a vezetési sáv alja a Γ pontban található (direkt átmenetű félvezetők), ezért elegendő volt a Γ pontban meghatározni az energiaértékeket.



1. ábra

A használt speciális pont a következő volt:

$$\frac{2\pi}{a} \left[\frac{\sqrt{2}}{4}, \frac{\sqrt{2}}{4}, \frac{1}{36} \right].$$

A kapott eredmények a következők:

Valenciasáv maximuma:

$$E_v(\text{GaAs}) = 9.380 \text{ eV}$$

$$E_v(\text{ZnSe}) = 7.557 \text{ eV}$$

Vezetési sáv minimuma:

$$E_c(\text{GaAs}) = 10.309 \text{ eV}$$

$$E_c(\text{ZnSe}) = 10.017 \text{ eV}$$

Az átlagpotenciálhoz viszonyított valenciásáv maximumok különbsége:

$$\Delta E_v = E_v(\text{ZnSe}) - E_v(\text{GaAs}) = -1.823 \text{ eV}$$

A tilos sáv szélessége:

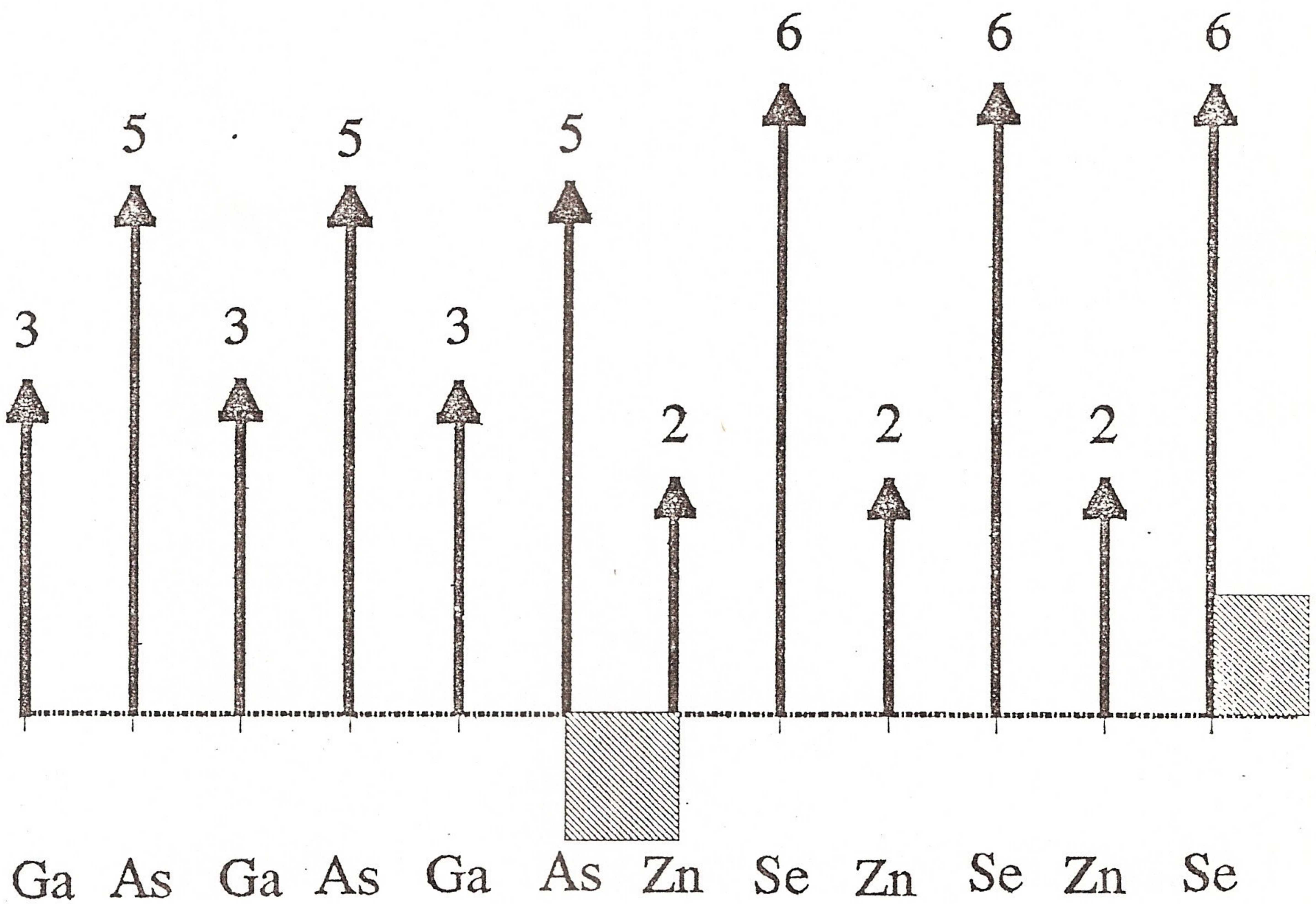
$$E_g(\text{GaAs}) = 0.93 \text{ eV}$$

$$E_g(\text{ZnSe}) = 2.46 \text{ eV}$$

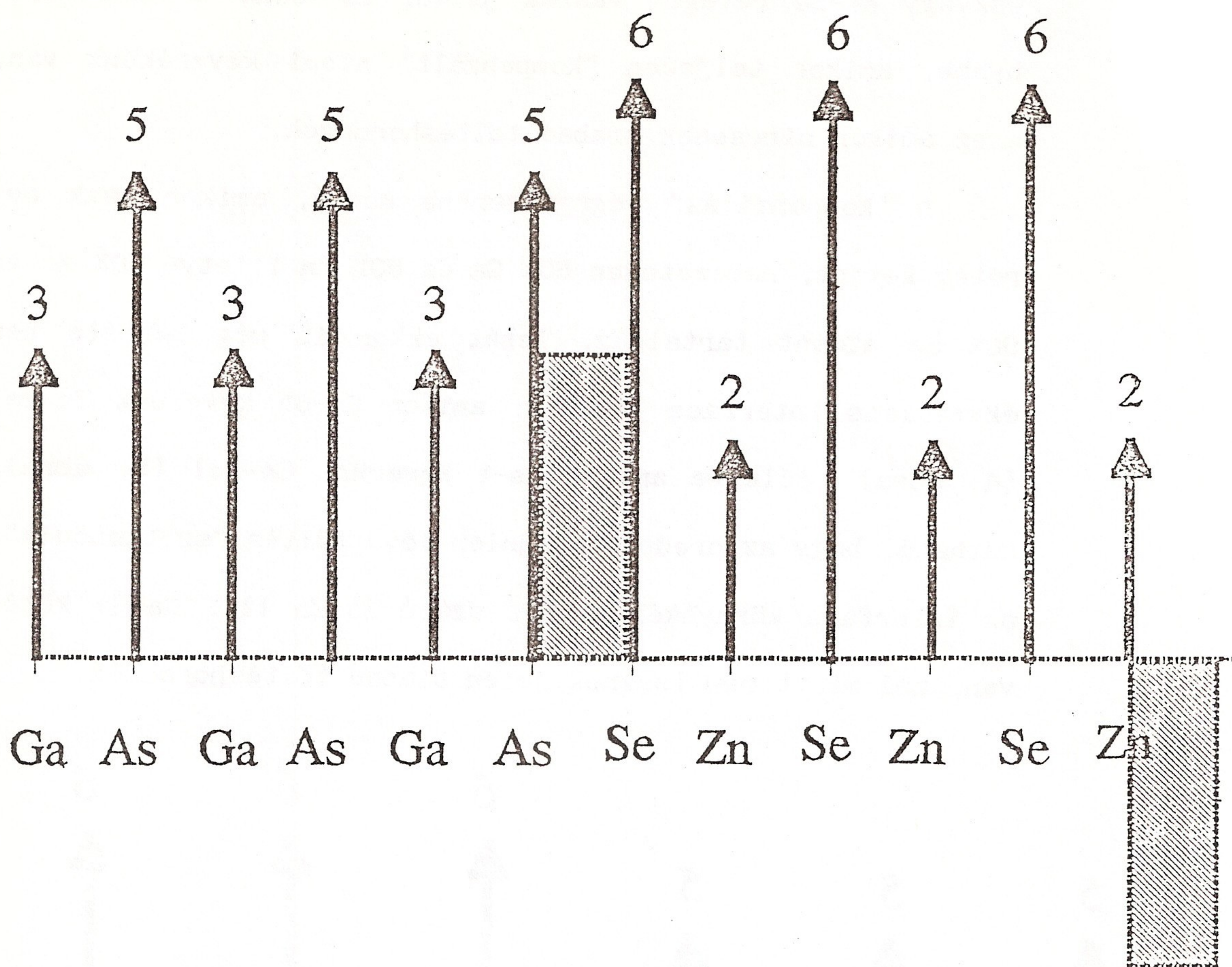
2. FEJEZET

ATOMI RÉTEGEK KEVERÉSE AZ INTERFACE-NÉL

Mivel a GaAs a III-V csoportba, a ZnSe a II-VI csoportba tartozik, a GaAs/ZnSe heterovalens interface. A (001) irányú interface-t vizsgáltam. Ebben az irányban két nem ekvivalens interface létezik attól függően, hogy az interface-nél As réteg Zn réteggel vagy Se réteggel találkozik. Az első esetet a 2. ábra, a második esetet a 3. ábra szemlélteti. A nyilak a pontszerű magtöltéseknek megfelelő delta függvényeket jelképezik, a vonalkázott terület az ezekből számolt makroszkopikus átlagnak az átlagértéktől (8 elektron/FCC cella) való eltérését mutatja.



2. ábra



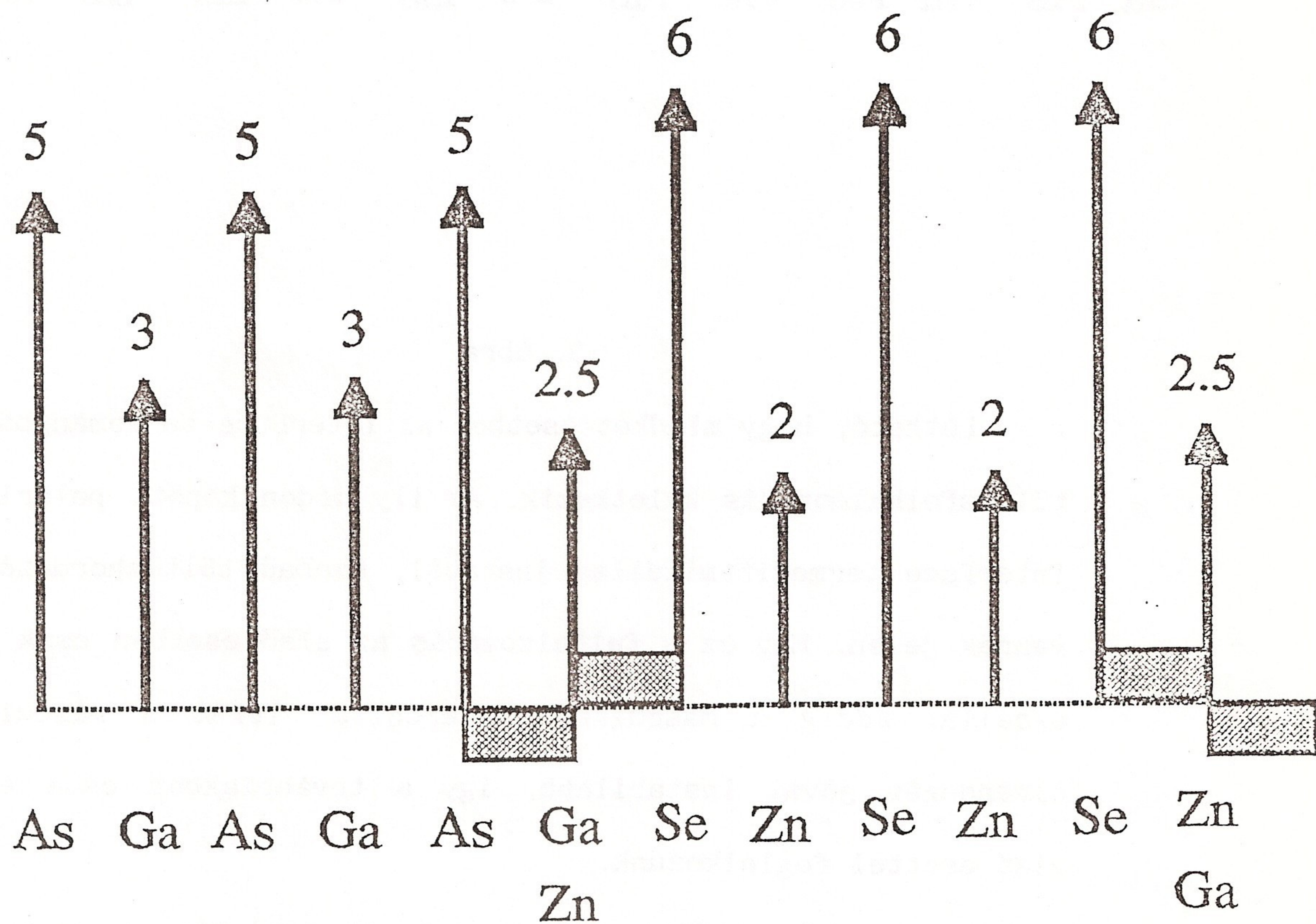
3. ábra

Látható, hogy mindkét esetben az interface-tartományban töltésfelhalmozódás keletkezik. Az ily módon kapott poláris interface termodinamikailag instabil, szabad töltéshordozók vannak jelen. Míg ez a felhalmozódás az első esetben csak 1 e/cella, addig a másodikban 3 e/cella. Tehát a második elrendezés jóval instabilabb, így a továbbiakban csak az első esettel foglalkozunk.

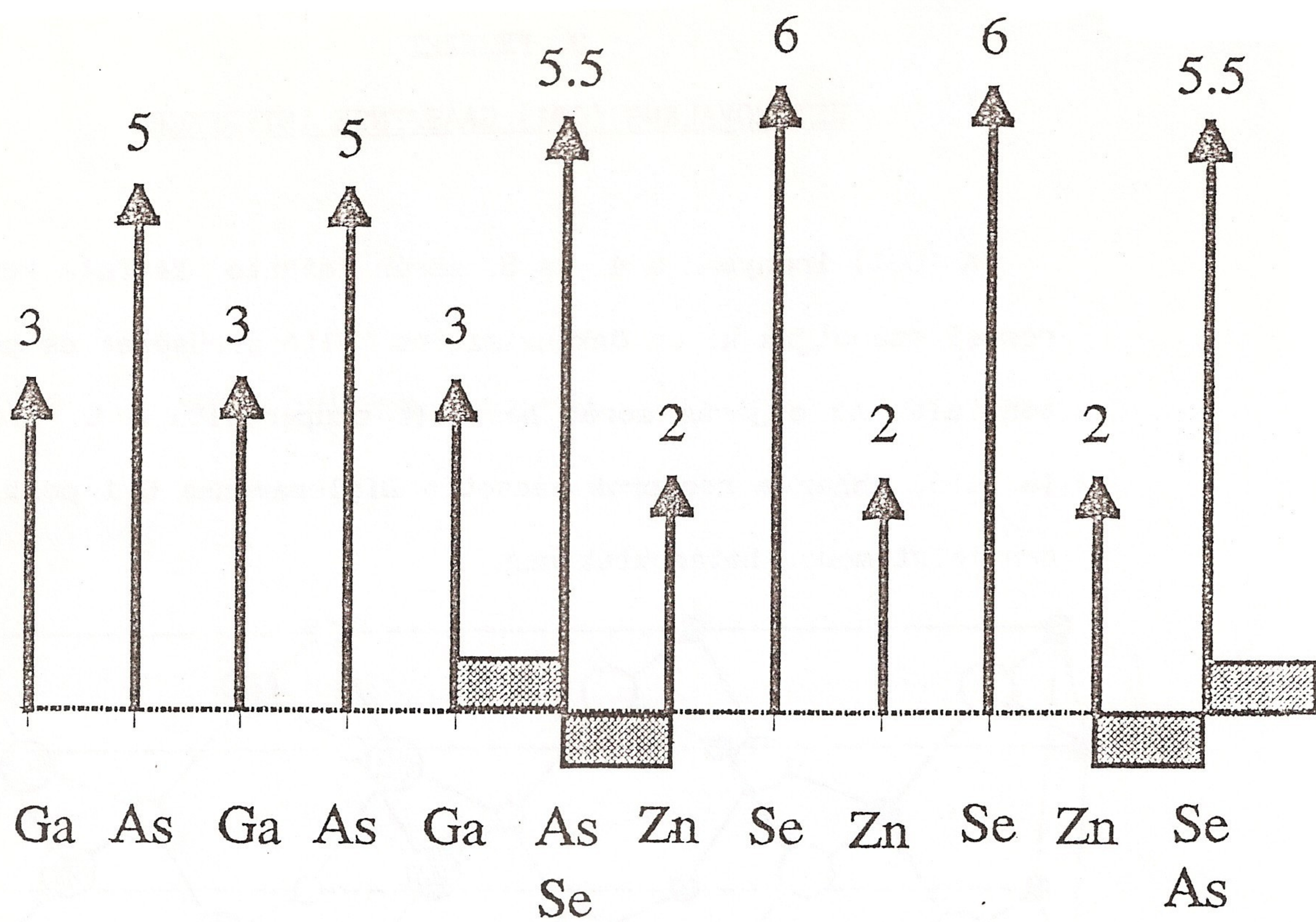
Az interface-töltések makroszkopikus elektromos teret keltenek, ami megváltoztatja a rendszer energiáját. Martin [1] megmutatta, hogy az energia alacsonyabb abban az esetben, amikor az interface-nél kevert Ga-Zn, Ga-Se, As-Zn

és/vagy As-Se rétegek vannak jelen; és akkor a legalacsonyabb, amikor teljesen "kompenzált" atomi keverékünk van, azaz amikor nincsenek szabad töltéshordozók.

A "kompenzáció" legegyszerűbb módja, amikor csak egy réteg kevert, nevezetesen 50% Ga és 50% Zn illetve 50% As és 50% Se atomot tartalmaz. Tehát ekkor is még kétféle nem ekvivalens interface létezik: amikor Ga-ot keverünk Zn-kel (4. ábra) illetve amikor As-t keverünk Se-nel (5. ábra). Látható, hogy az eredetileg jelen lévő töltés "szétkenődik"; az interface környékén azonos számú As-Zn ill. Ga-Se kötés van, ami miatt nem lesznek jelen szabad töltéshordozók.



4. ábra

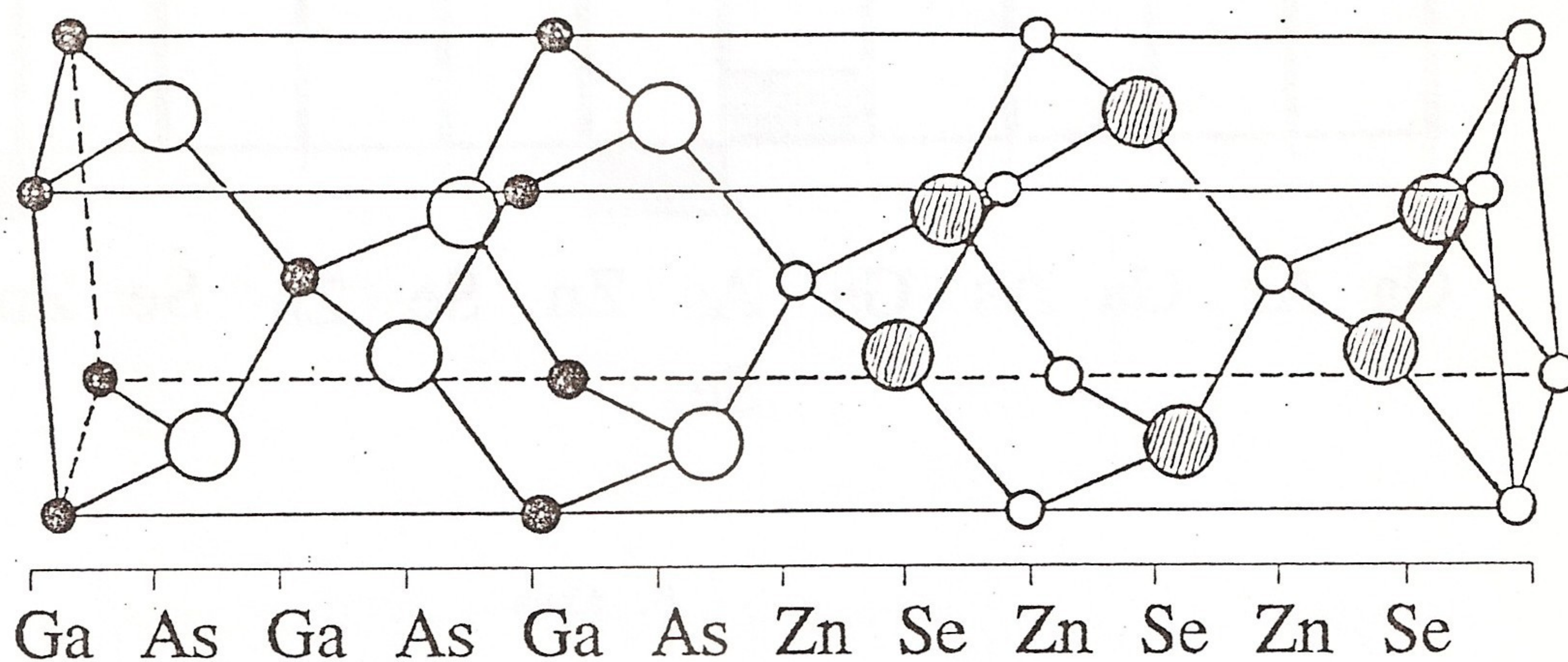


5. ábra

3. FEJEZET

HETEROVALENS (001) GAAS/ZNSE INTERFACE

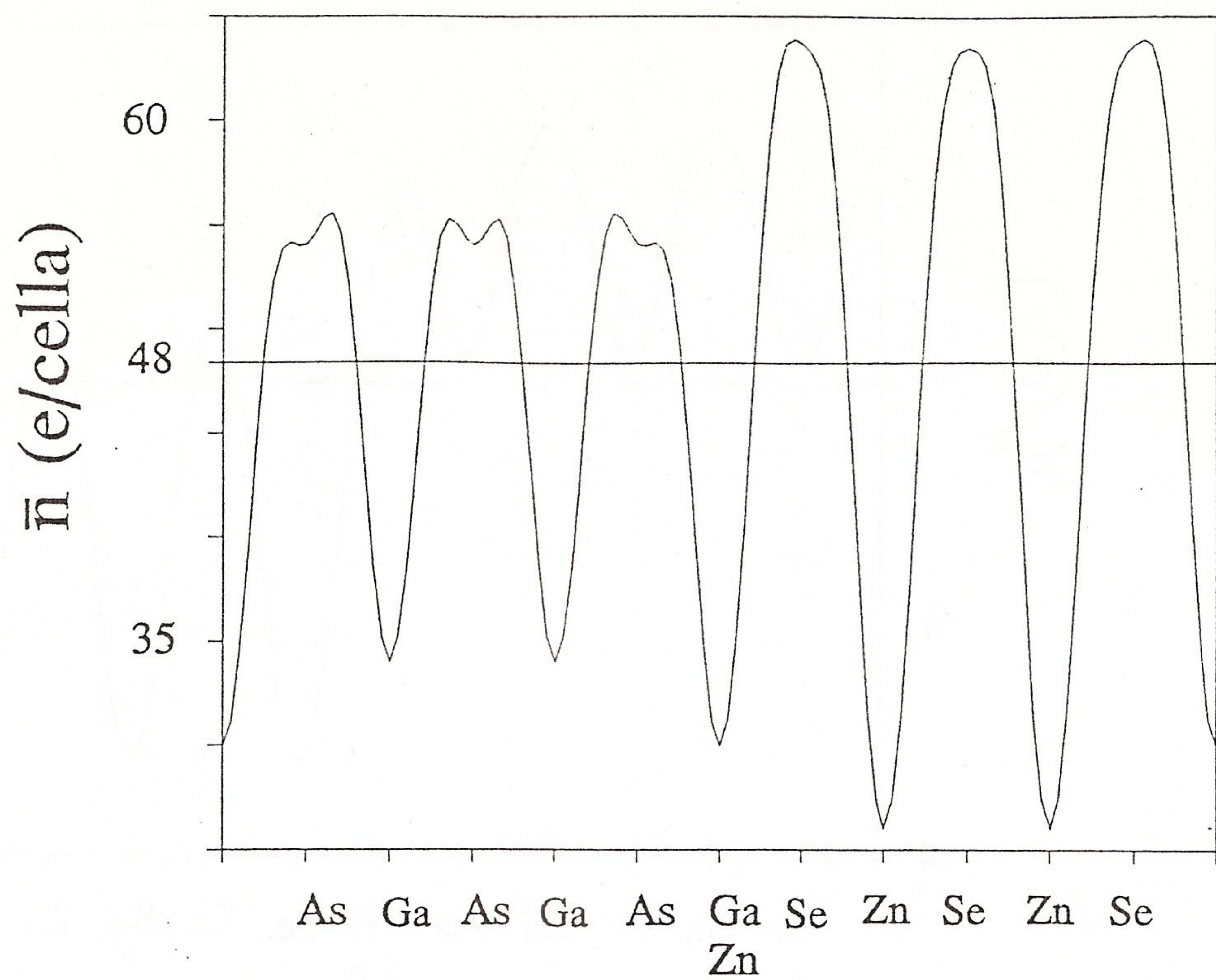
A (001) irányban a 4. és 5. ábrán látható kétféle keveréssel számoljuk ki az önkonzisztens töltéssűrűséget és potenciált. Az eljárás során használt szupercella a 6. ábrán látható, ehhez a reciprok rácsot a Diplomamunka 6.1 pontjában leírt módon határoztuk meg.



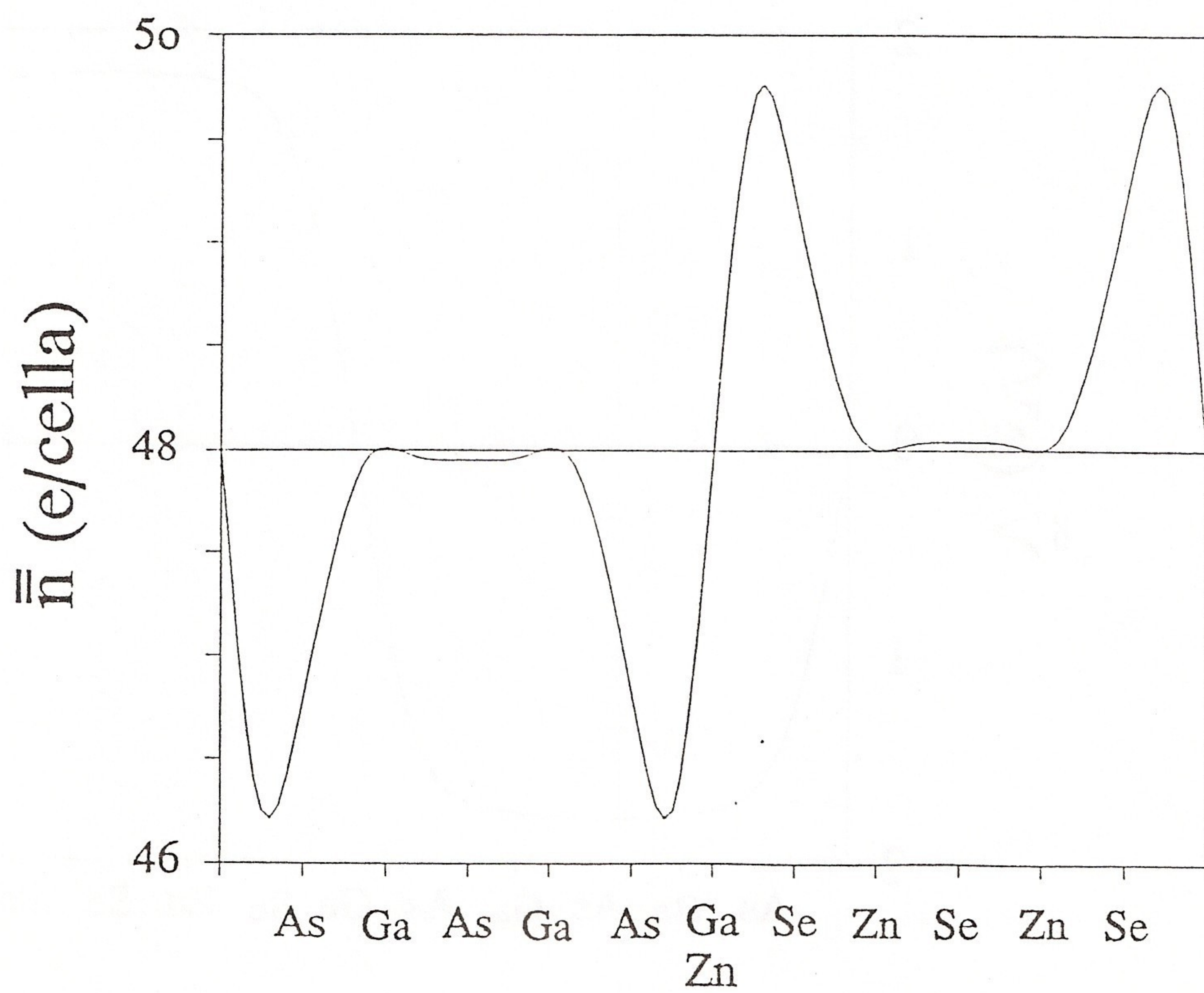
6. ábra

A kapott eredményeket az alábbi felsorolás szerinti ábrák mutatják:

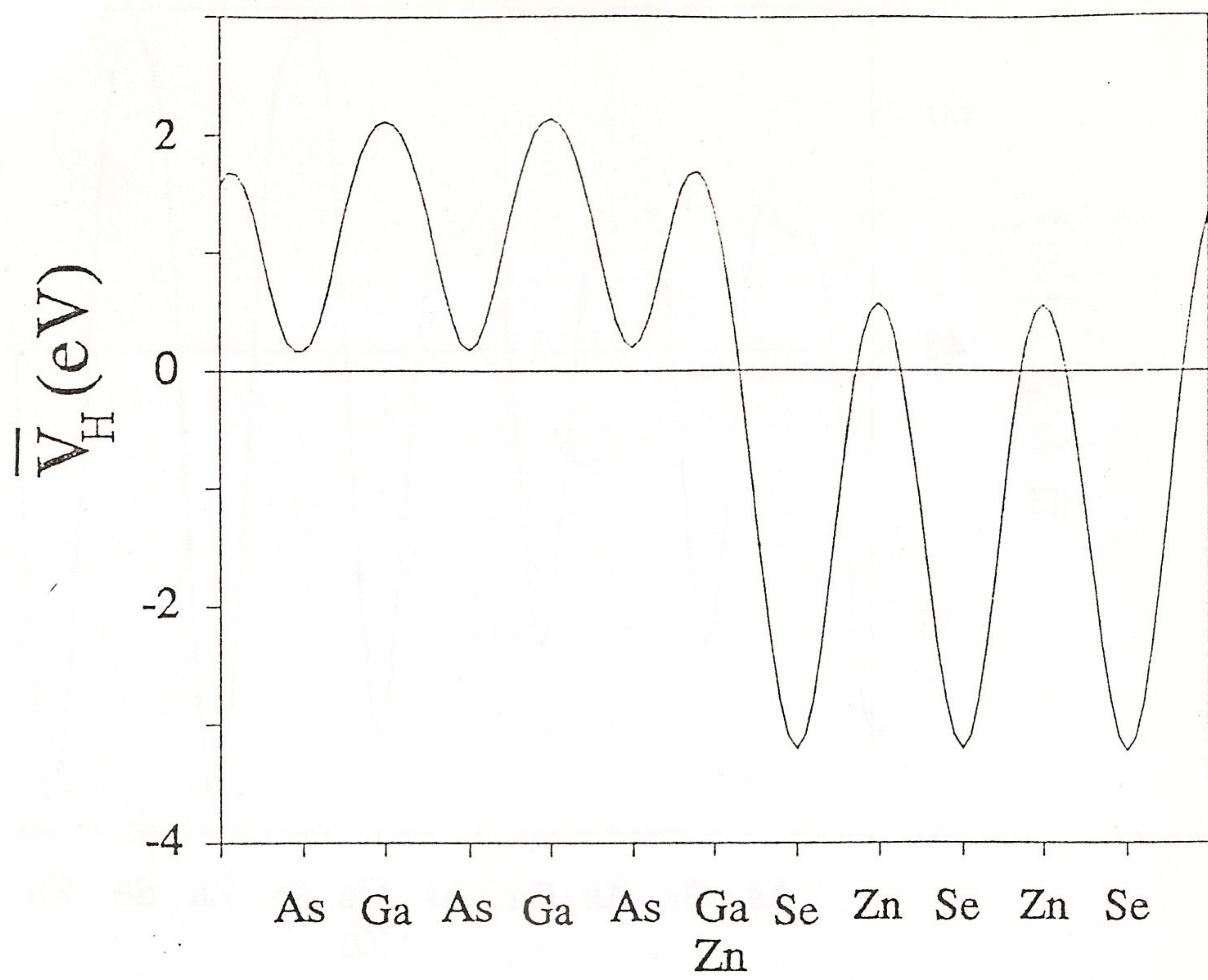
Keverés:		
	<u>Ga-Zn</u>	<u>As-Se</u>
Töltéssűrűség síkbeli átlaga	: 7. ábra	11. ábra
Töltéssűrűség makroszkopikus átlaga:	8. ábra	12. ábra
Potenciál síkbeli átlaga	: 9. ábra	13. ábra
Potenciál makroszkopikus átlaga	: 10. ábra	14. ábra



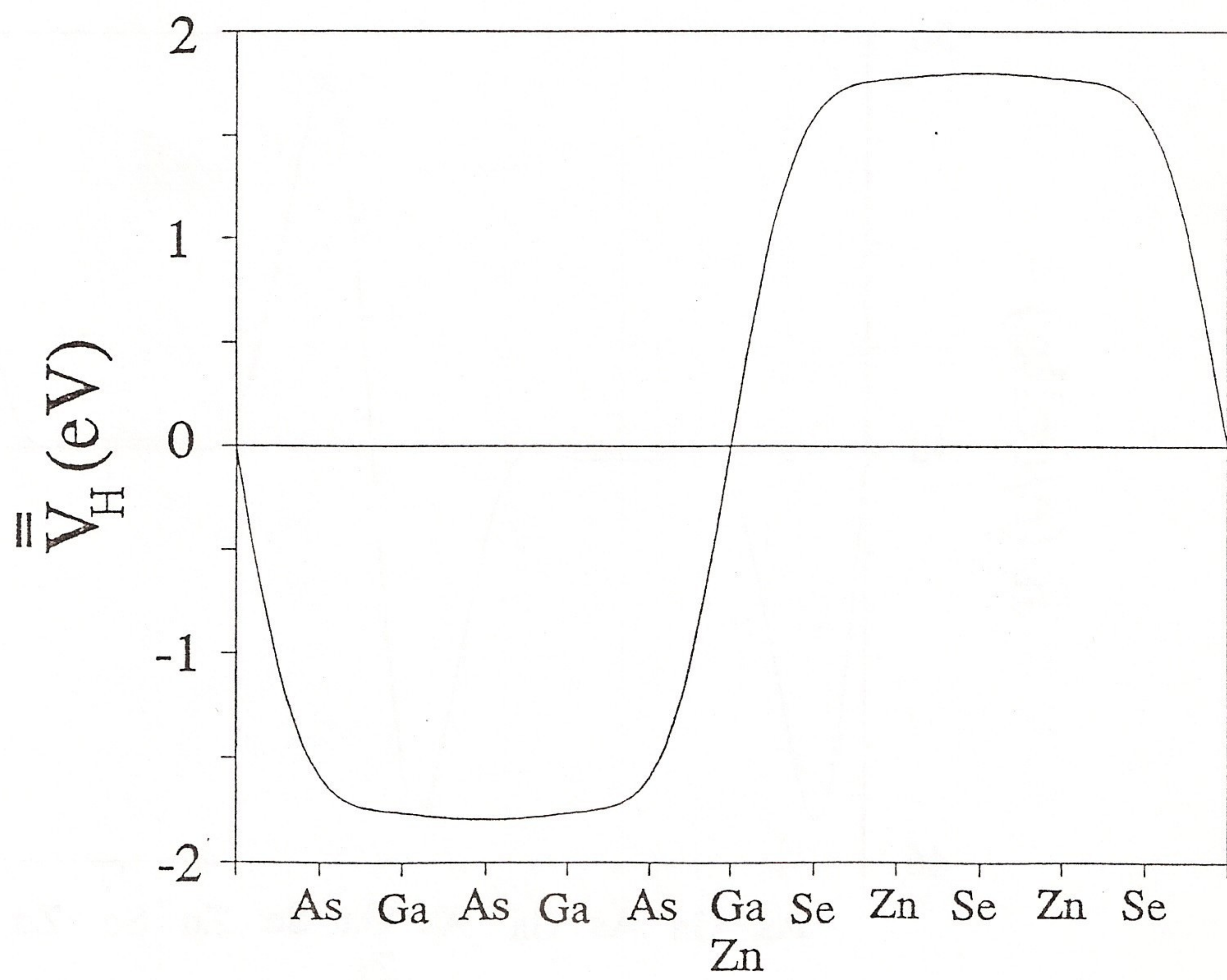
7. ábra



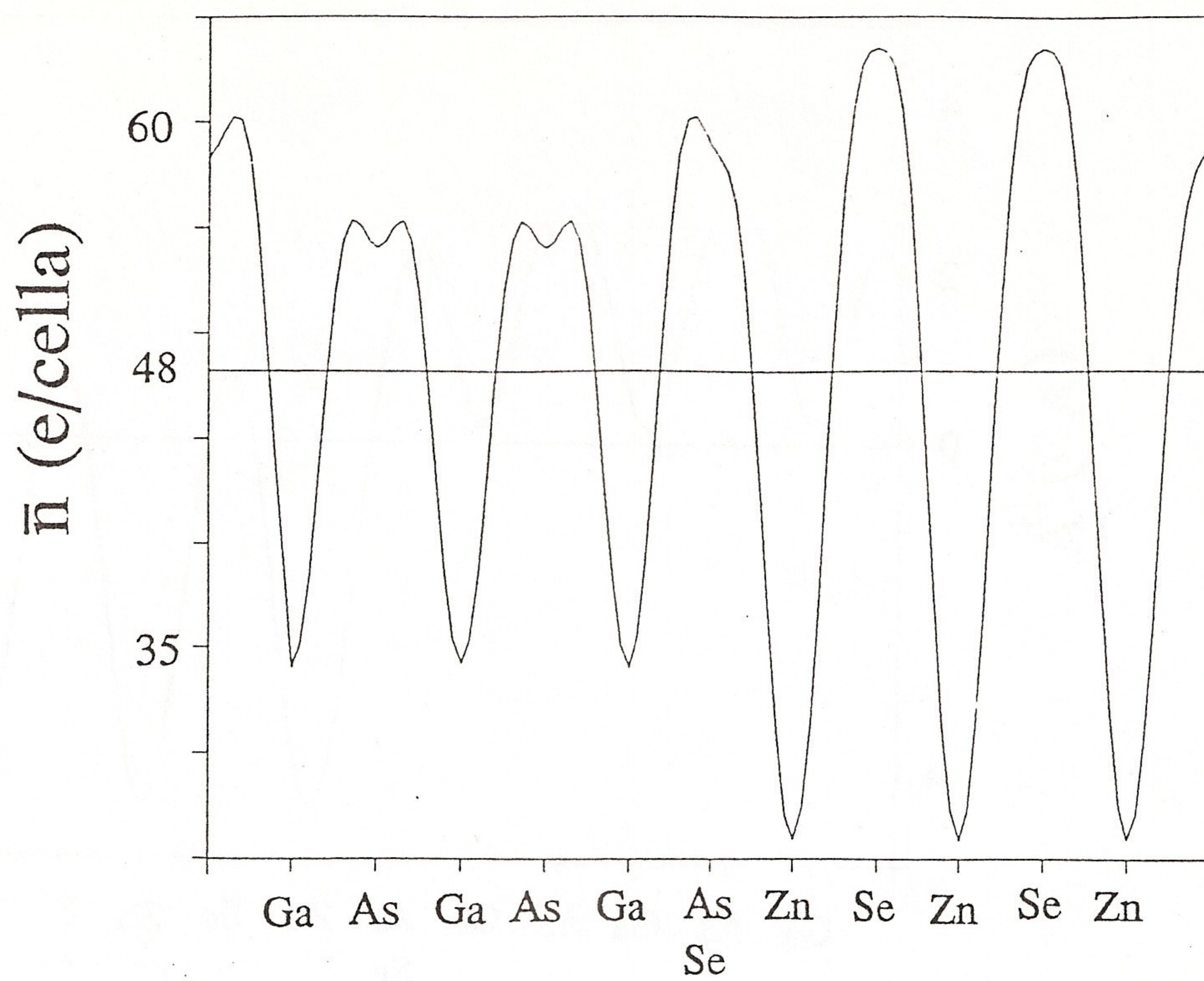
8. ábra



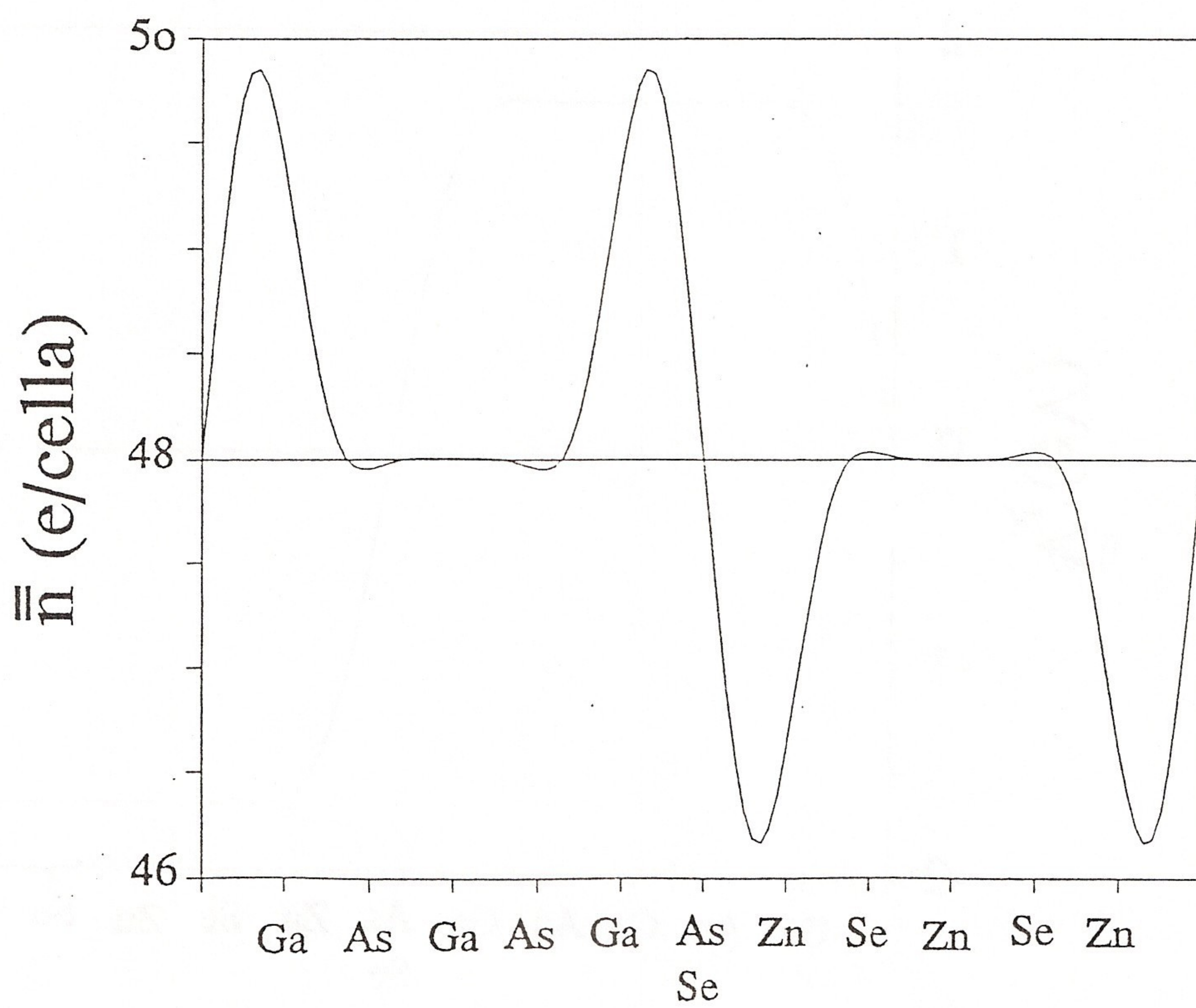
9. ábra



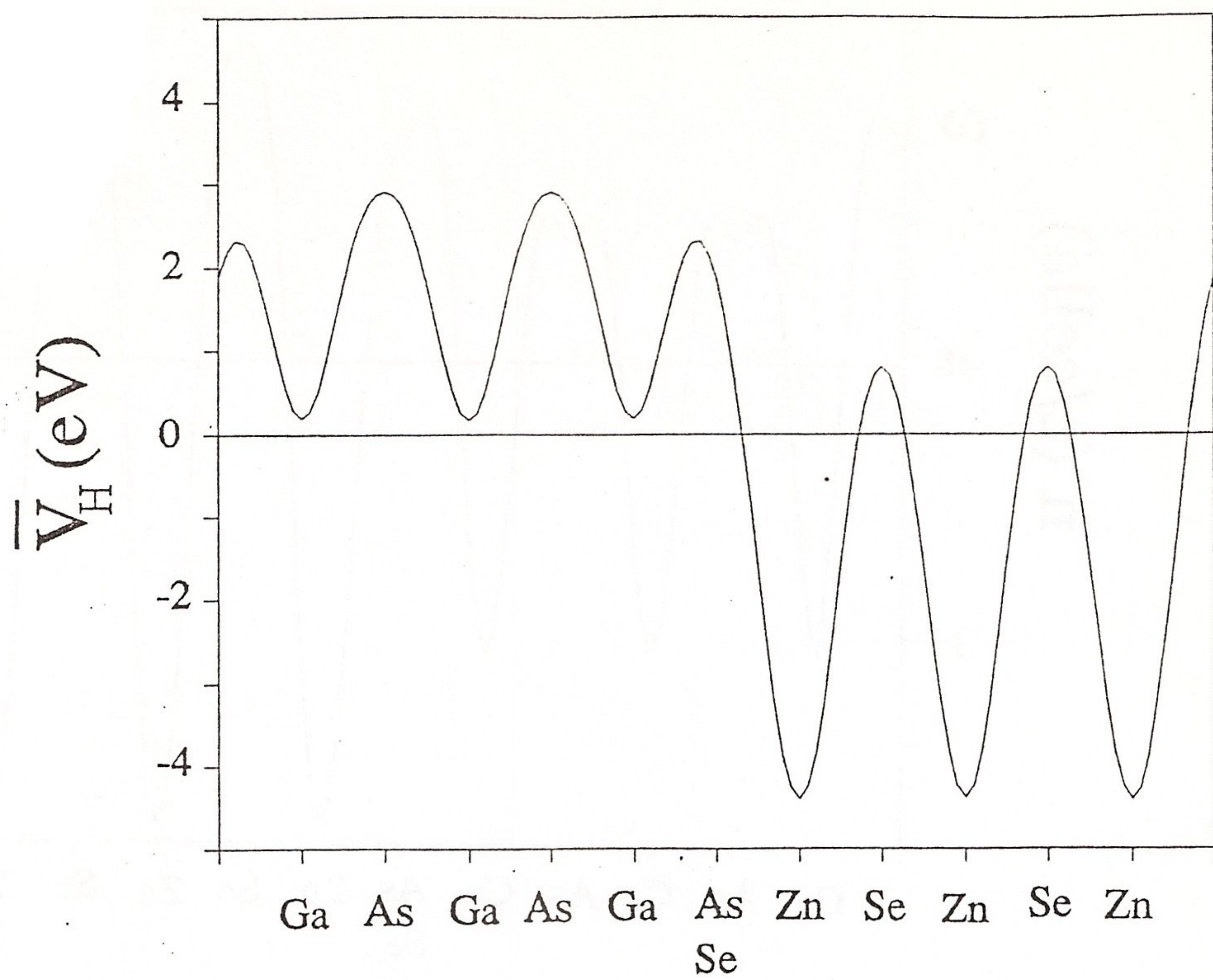
10. ábra



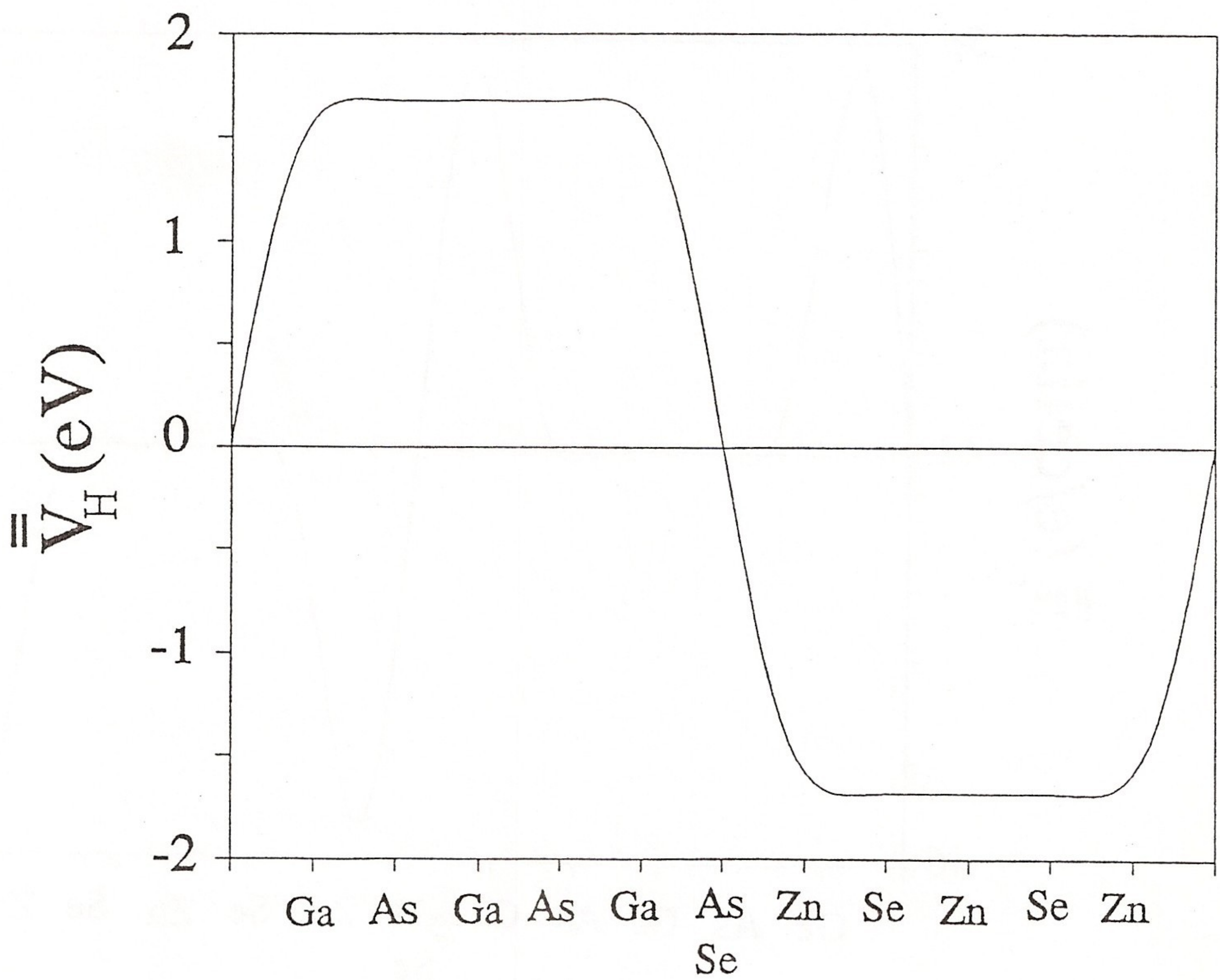
11. ábra



12. ábra



13. ábra



14. ábra

A Hartree-potenciál eltolódása:

$$\text{Ga/Zn: } 3.593 \text{ eV}$$

$$\text{As/Se: } -3.361 \text{ eV}$$

Ez azonban még csak az elektronoktól származó potenciálkülönbség, amelyet a 8. ill. a 12. ábrán látható interface-dipól eredményez. Jelen esetben azonban nemcsak az elektronok, hanem a magok is dipólszerű elrendezést mutatnak, ahogy az a 4. ill. az 5. ábrán látható. Ha ennek a ponttöltésrendszernek a potenciálját átlagoljuk, akkor a 10. ill. a 14. ábrán láthatóhoz hasonló függvényt kapunk $\pm 4.002 \text{ eV}$ eltolódással. Ezt hozzáadva a Hartree-potenciál eltolódásához, a teljes elektrosztatikus potenciál eltolódásra kapjuk:

$$\text{Ga/Zn: } \Delta V = -0.409 \text{ eV}$$

$$\text{As/Se: } \Delta V = 0.641 \text{ eV}$$

A korábban megkapott $\Delta E_v = -1.823 \text{ eV}$ értéket módosítanunk kell a spin-pálya kölcsönhatásból eredő korrekcióval. A spin-pálya felszakadás a GaAs-nál 0.34 eV , a ZnSe-nél pedig 0.43 eV [2]. A korrekció: $0.43/2 - 0.34/2 = 0.045$. Tehát:

$$\Delta E_v = -1.778 \text{ eV}$$

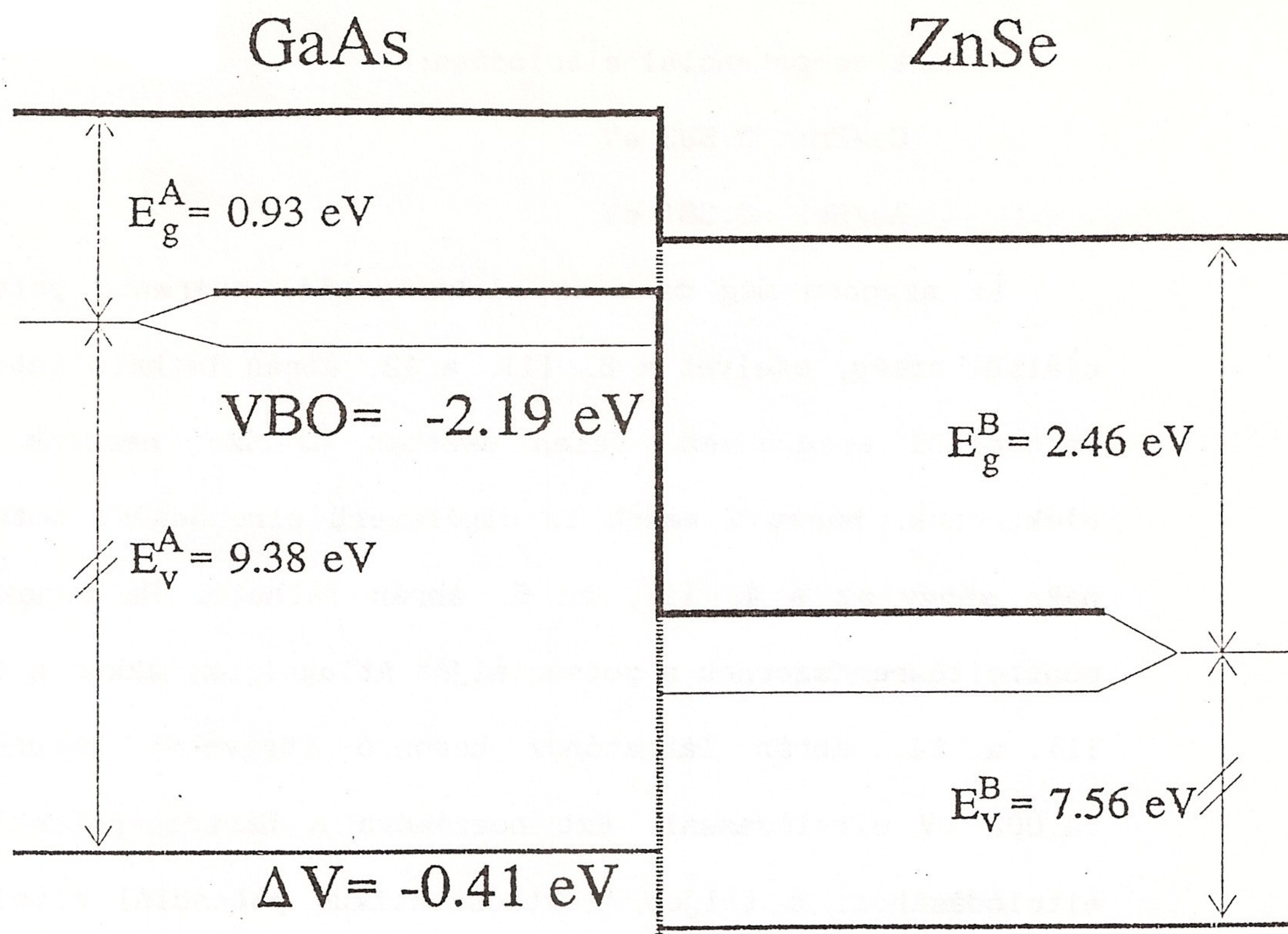
A VBO a Diplomamunka 3.12 egyenlete alapján a következőképpen számolható: $VBO = \Delta E_v + \Delta V$. Tehát:

$$\text{Ga/Zn: } VBO = -2.187 \text{ eV}$$

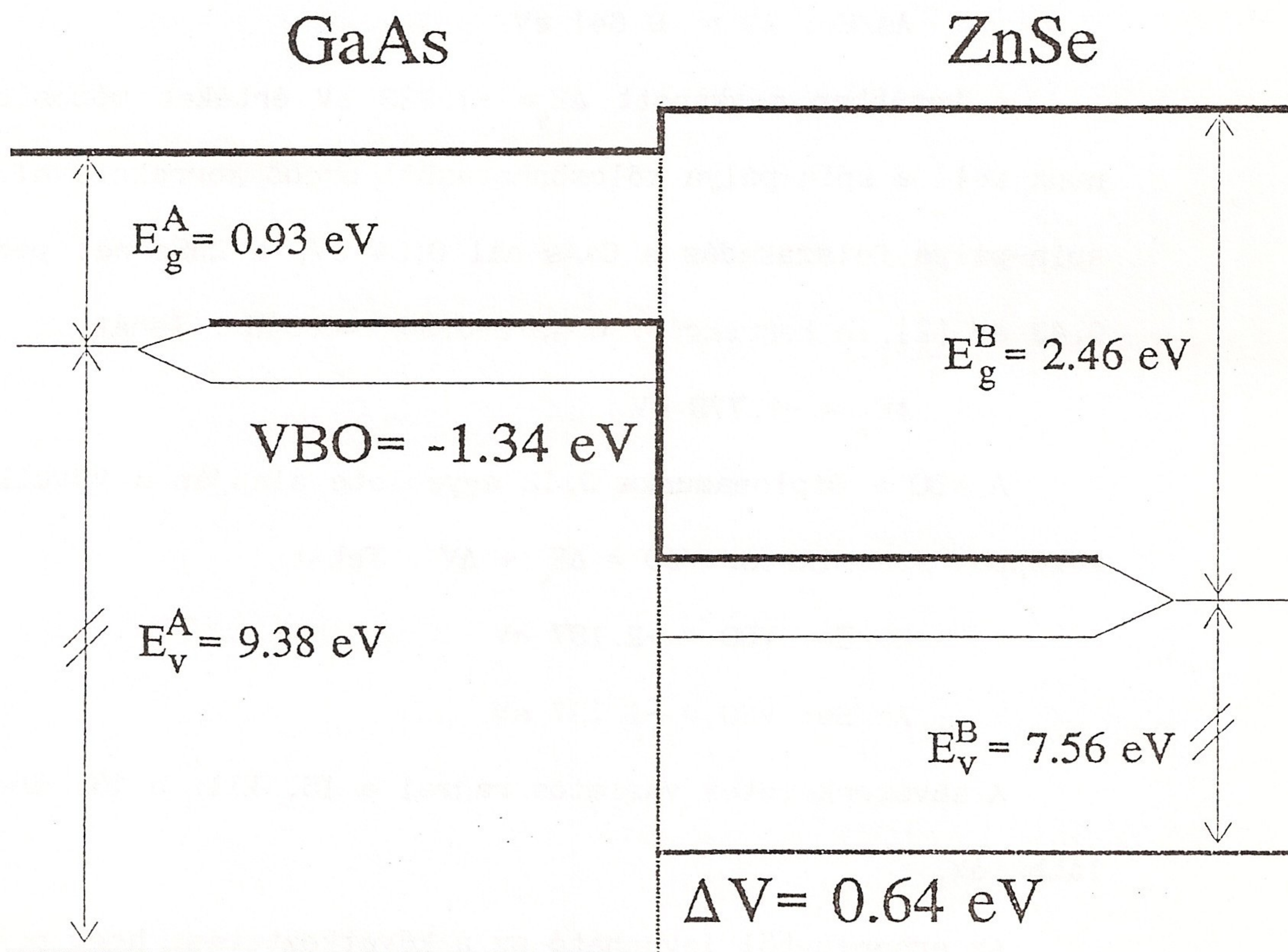
$$\text{As/Se: } VBO = -1.137 \text{ eV}$$

A sávszerkezetek vázlatos rajzai a 15. ill. a 16. ábrán láthatók.

Az eredményből levonható az a következtetés, hogy poláris interface-eknél a potenciál eltolódás erősen függ az in-



15. ábra



16. ábra

terface környékén található atomi elrendeződéstől. Ezt támasztják alá M. Peressi [3] (001) GaAs/Ge átmenetre elvégzett számolásai is; Ga/Ge keverésnél 0.82 eV, As/Ge keverésnél 0.22 eV értéket kapott a VBO-ra. A heteroátmenetek elméletében a poláris interface-ek problémája még nyitott kérdésnek számít és további tanulmányozásra vár.

Az (110) irányú interface nem poláris, itt az előbbiekben említett problémák nem merülnek fel, ezért ez a (001) iránynál jóval egyszerűbb esetnek minősül. Ennek a számolására a későbbiekben kerül sor, de mivel általában ez az irány található meg a szakirodalomban, néhány mért és számolt eredményt a következőkben közreadok:

Kovalczyk és társai [4] -1.10 eV-os, Kroemer [5] pedig -0.96 eV-os kísérleti eredményt közöltek a VBO-ra.

Elméleti úton a következő eredményeket kapták:

- Van de Walle és Martin [2] SCIC (Self Consistent Interface Calculation) eljárás során nem lokális ab-initio pseudopotenciál [6] használatával: -1.59 eV
- Pickett és Cohen [7] empirikus pseudopotenciál használatával: -2.0 ± 0.3 eV
- Tersoff [8] egy CNP (Charge Neutrality Point) eljárás során: -1.2 eV
- Harrison [9] szoroskötés közelítéssel: -1.35 eV
- LMTO (Linear Muffin-Tin-Orbital Method) [10] módszerrel
Christensen és Anderson [2] : -1.75 eV
Cardona és Christensen [11] : -1.13 eV

- [1] R. M. Martin, *Proceedings of the Conference on Physics of Compound Semiconductor Interfaces, Estes Park, Colorado, 1980*, J. Vac. Sci. Technol. **17**, 978 (1980)
- [2] C. G. Van de Walle and R. M. Martin, Phys. Rev. B **35**, 8154 (1987); Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **63**, 21 (1985); J. Vac. Sci. Technol. B **4**, 1055 (1986)
- [3] M. Peressi: *Energy-Band Discontinuities At Lattice-Matched Semiconductor Heterojunctions* (Trieste, 1989)
- [4] S. P. Kowalczyk, J. T. Cheung, E. A. Kraut and R. W. Grant, Phys. Rev. Lett. **56**, 1605 (1986); Kowalczyk, Kraut, J. R. Waldrop and Grant, J. Vac. Sci. Technol. **21**, 482 (1982)
- [5] H. Kroemer, CRC Critical Rev. Solid State Sci. **5** (1975) 555.; *Proceedings of the NATO Advanced Study Institute on Molecular Beam Epitaxy and Heterostructures*, Erice, Sicily, 1983, edited by L. L. Chang and L. Ploog (Martinus Nijhoff, The Netherlands, 1984)
- [6] G. B. Bachelet, D. R. Hamann and M. Schlüter, Phys. Rev. B **26**, 4199 (1982)
- [7] W. E. Pickett, S. G. Louie and M. L. Cohen, Phys. Rev. B **17**, 815 (1978); J. Ihm and Cohen, *ibid.* **20**, 729 (1979); Pickett and Cohen, *ibid.* **18**, 939 (1978)
- [8] J. Tersoff, J. Vac. Sci. Technol. B **4**, 1066 (1986)
- [9] W. A. Harrison and Tersoff, J. Vac. Sci. Technol. B **4**, 1068 (1986)
- [10] O. K. Andersen, Phys. Rev. B **12**, 3060 (1975)

[11] M. Cardona and Christensen, Phys. Rev. B 35, 6182
(1987)

[12] P. Sz. Kirijev: Félvezetők fizikája, Tankönyvkiadó,
Bp., 1974