

**СРАВНЕНИЕ НА ОТМЕСТВАНИЯТА НА ЩАРК НА ЕЛЕКТРОННИТЕ  
СЪСТОЯНИЯ В НЯКОИ ЕДИНИЧНИ ПРАВОЪГЪЛНИ И НЕПРАВОЪГЪЛНИ  
(ПАРАБОЛИЧНИ И ЛИНЕЙНИ) КВАНТОВИ ЯМИ:  
ПРЕСМЯТАНИЯ С МЕТОДА НА СИЛНАТА ВРЪЗКА**

**Аделина Митева**

*Институт за космически изследвания и технологии – Българска академия на науките  
e-mail: ad.miteva@gmail.com*

**Ключови думи:** *полупроводникови квантови ями, квантово ограничен Щарк ефект, метод на силната връзка, AlGaAs, електронни състояния, електрично поле, квантови ями с променлив химичен състав, параболични и линейни квантови ями*

**Резюме:** *Пресметнати са електронните и дупчести състояния в полупроводникови квантови ями с постоянен и променлив химичен състав, а именно правоъгълни и параболични, и линейни квантови ями, без и при прилагане на надлъжно постоянно електрично поле. Пресметнати са също и енергиите на основните оптични преходи с и без поле, както и пространствените им разпределения. Целта на работата е да се сравнят пресметнатите квантови ями, които са с еднаква ширина, но с различен концентрационен профил в присъствието на постоянно електрично поле. Направено е сравнение с наличните експериментални данни за такива квантови ями.*

**STARK SHIFTS COMPARISON OF ELECTRONIC STATES IN SOME  
RECTANGULAR AND NON-RECTANGULAR (PARABOLIC AND LINEAR)  
QUANTUM WELLS: TIGHT BINDING CALCULATIONS**

**Adelina Miteva**

*Space Research and Technology Institute – Bulgarian Academy of Sciences  
e-mail: ad.miteva@gmail.com*

**Key words:** *semiconductor quantum wells, quantum confined Stark effect, tight binding method, AlGaAs, electronic states, electric field, graded-gap quantum wells, parabolic quantum wells, linear quantum wells*

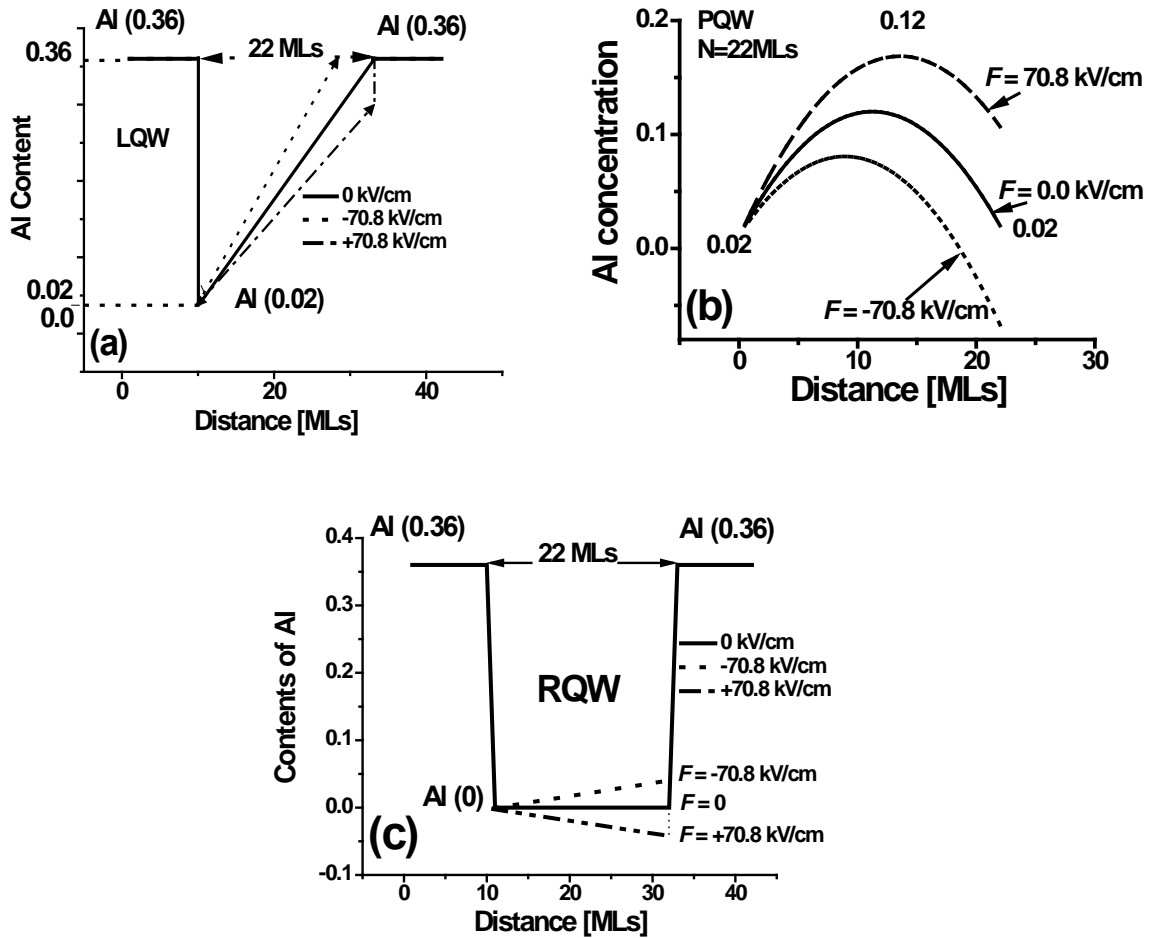
**Abstract:** *In this paper are calculated electronic and hole states in semiconductor quantum wells with constant and variable chemical composition (graded-gap quantum wells), namely rectangular and parabolic, and linear quantum wells, with and without the application of a longitudinal constant electric field. The energies of the main optical transitions and their spatial distributions are also calculated, with and without the application of electric field. The aim of this work is the comparison of these quantum wells (that are with the same width but with different concentration profiles) in the presence of an electric field. A comparison with the available experimental data for these quantum wells has been made.*

**Въведение**

Квантово ограниченият Щарк ефект (QCSE) е добре известен във физиката на кондензираната материя, в материалознанието, в електрониката, в технологията и във физиката на полупроводниковите нанохетероструктури [1-3]. Действието на много полупроводникови устройства се основава на този ефект [2,3]. Някои от основните характеристики на Щарк ефекта и основните характеристики на устройствата, базирани на този ефект, са изследвани в различни квантови структури и с помощта на различни експериментални техники и няколко теоретични методи [1-6]. В някои предишни работи, наши и на други автори [7-12], QCSE е изследван в квантови ями с различни правоъгълни и

неправоъгълни концентрационни профили в рамките на полу-емпиричния  $sp^3s^*$  метод на силната връзка. Има много работи върху електронните свойства на различни квантови ями с правоъгълни [13-18,7,21], линейни [14,17-19,21,22] и параболични [14,19,20] профили, дължащи се на особените характеристики, които тези квантови структури показват. В настоящата работа, ние извършваме подробно сравнение на QCSE в единични квантови ями, с еднаква ширина, но с различни (правоъгълни, параболични и линейни) профили на концентрацията. За числените пресмятания ние сме прилагали методиката, описана и прилагана в [7-12,21,22]. Обърнато е специално внимание на отразяването на величината на отместванията на Щарк и критичните стойности на електричното поле, които се изчисляват и сравняват в различните видове квантови ями с еднаква ширина. Направено е сравнение и с наличните теоретични и експериментални данни за Щарк ефекта в такива или близки квантови ями.

### Модел и метод



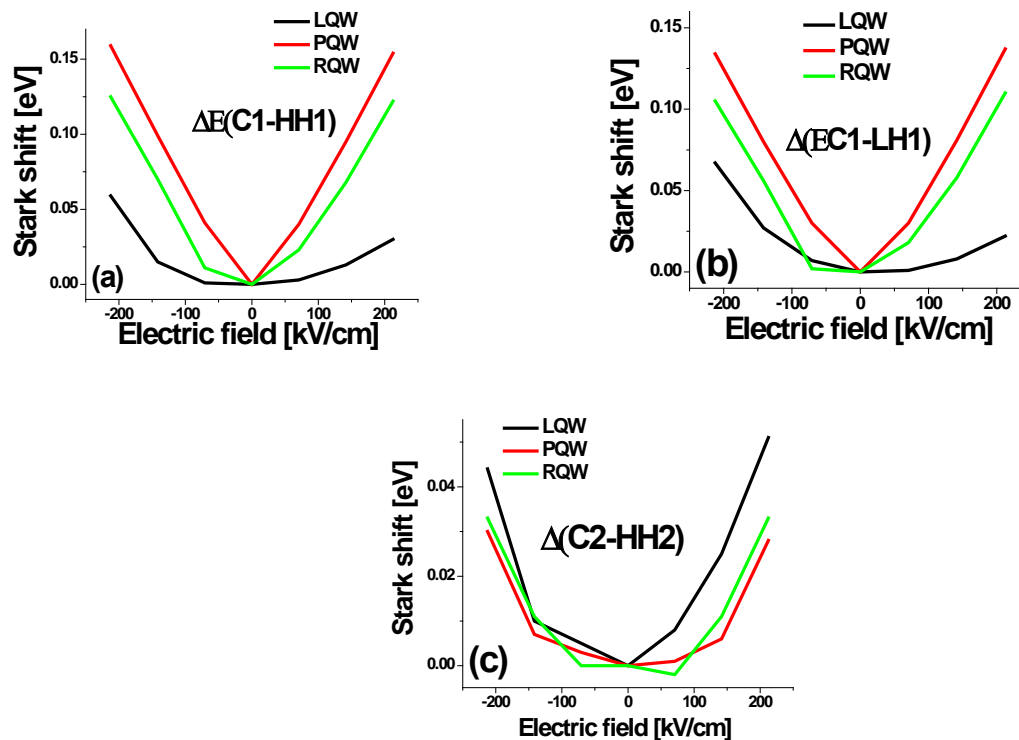
Фиг. 1. Схематична зонна диаграма на профила на концентрацията  $x$  за QWs с ширина 22 MLs, без и с прилагане на постоянно електрическо поле  $F$ . Фиг. 1 (a) – LQW; Фиг. 1 (b) – PQW; Фиг. 1 (c) – RQW. С плътна линия е QW без поле  $F$ . С линия от точки е профилът на QW при прилагане на отрицателно поле. С линия с тирета и точки е профилът на QW при прилагане на положително поле.

В тази работа представяме резултатите от численото пресмятане на единични квантови ями (QWs) от тип  $Al_xGa_{1-x}As$ , с линеен концентрационен профил (LQW), с параболичен концентрационен профил (PQW) и с правоъгълен концентрационен профил (RQW), при прилагане на постоянно електрично поле  $F$  успоредно на посоката на кристално израстване  $z$  [001]. Концентрацията на Al,  $x$ , е константа във всеки слой, но зависи от индекса на слоя  $l$  (който нараства от 1 до  $N$  в направлението на растеж). Концентрацията  $x$  зависи от координатата  $z$ ,  $x(z)$ , съответно линейно, параболично или не зависи (постоянна е) в съответните QWs. Всички QWs, с един и същ концентрационен профил, са с ширини ( $N$ ) равни на 11, 22 и 44 монослоя (MLs). Като един монослой е равен на  $2.825 \times 10^{-10}$  м, или равен на два атомни слоя. Концентрацията  $x$  на Al в бариерите  $Al_xGa_{1-x}As$  за всички разглеждани ями е

постоянна и равна на 0.36. Т.е. всички бариери са полубезкрайни със състав  $\text{Al}_{0.36}\text{Ga}_{0.64}\text{As}$ . Концентрацията  $x$  на Al в областта на самата яма се променя линейно от 0.02 в левия край на ямата до 0.12 в десния край на ямата, съответно за трите разглеждани LQWs. В RQWs  $x$  е  $x=0$ . В PQWs  $x$  се променя параболично от 0.02 в краищата на ямите, т.е. при бариерите, до 0.12 в средата на QW за всичките три изследвани PQWs. На фигура 1 са представени схематично зонните диаграми на профила на концентрацията  $x$  за QWs с ширина  $N=22$  MLs (виж фиг. 1), без и с прилагане на постоянно електрическо поле  $F$ . Пресмятанията са направени за температура  $T = 0$  K.

За числените пресмятания сме използвали полумпиричното приближение на силната връзка (ТВ) и алгоритъма описан в [23-26]. Той дава възможност да се прилага метода на съшиване на Гриновите функции на крайна нехомогенна област (slab) с полубезкрайни хомогенни области [23,24]. Освен това позволява реалистични ТВ пресмятания на електронните състояния в квантови ями с променлив концентрационен профил в присъствие на постоянно електрично поле  $F$ . Описваме присъствието на външното постоянно електрично поле перпендикулярно на интерфейсите чрез отместване на диагоналните членове на матрицата на емпиричния хамилтониан на силната връзка по оста на кристален растеж в съгласие с линейното изменение на потенциала [24]. Електричното поле сме прилагали между първия и последния монослой на QW в посока на кристалното израстване. В бариерните области във всички QWs електричното поле е равно на нула. За пресмятане на ТВ параметрите на тройната сплав използваме приближението на виртуалния кристал. Навсякъде направлението на кристален растеж е  $[100]$ . Пресмятанията са направени за температура  $T = 0$  K.

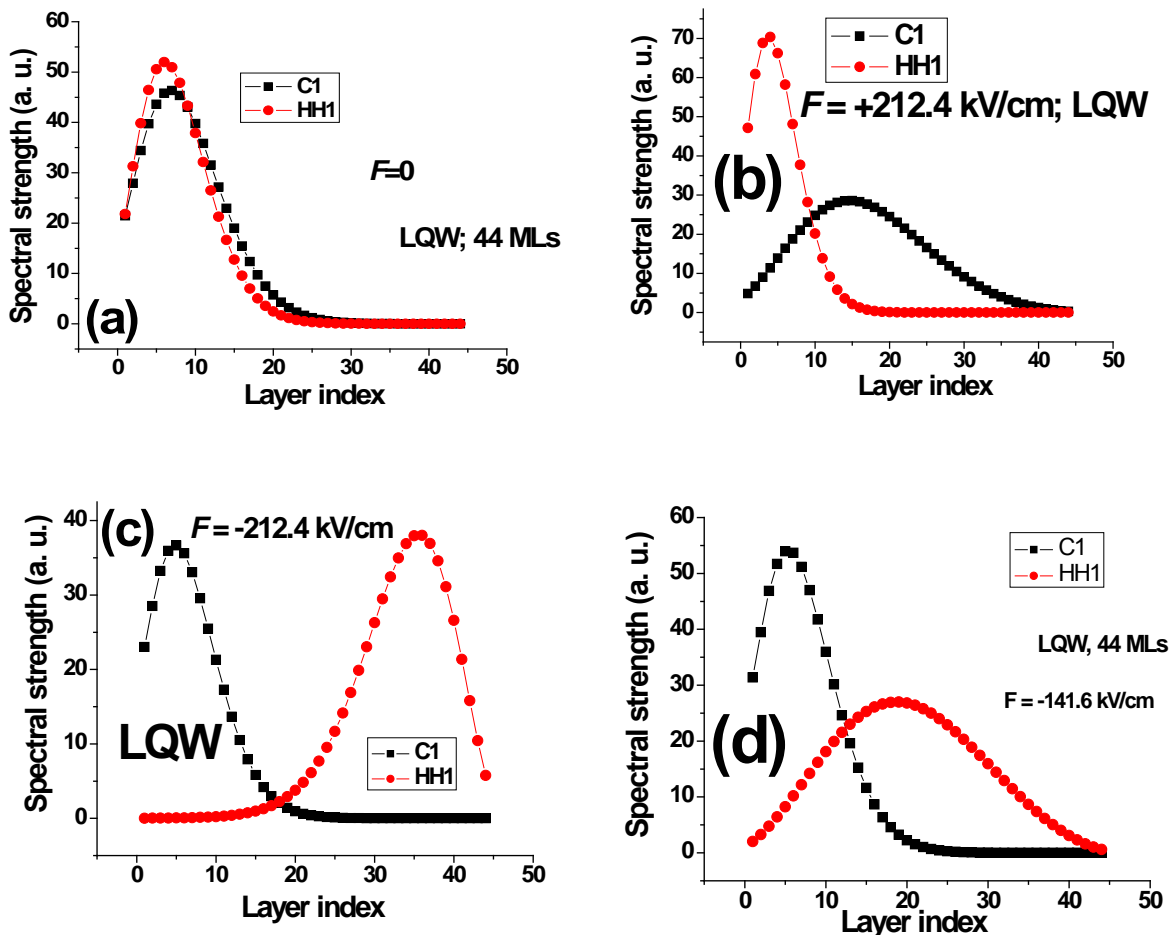
### Резултати и дискусия



Фиг. 2. Пресметнатите стойности на отместванията на Щарк за основните оптични енергии на преход  $E(\text{C1-HH1})$  – (a),  $E(\text{C1-LH1})$  – (b) и  $E(\text{C2-HH2})$  – (c) за три от изследваните QWs (LQW – черна линия, RQW – зелена линия и PQW – червена линия); и трите с еднаква ширина от 44 MLs) от приложеното електрично поле.

На фигура 2 са представени резултатите от пресметнатите стойности на отместванията на Щарк (по отношение на стойностите при поле нула) за енергиите на основните оптични преходи  $\Delta E(\text{C1-HH1})$ ,  $\Delta E(\text{C1-LH1})$  и  $\Delta E(\text{C2-HH2})$  за три от пресметнатите QWs (LQW, RQW и PQW; и трите с ширина  $N = 44$  MLs) от приложеното електрично поле. Забелязва се, че влиянието на електричното поле  $F$  е еднакво и за трите разглеждани QWs: с нарастване на приложеното

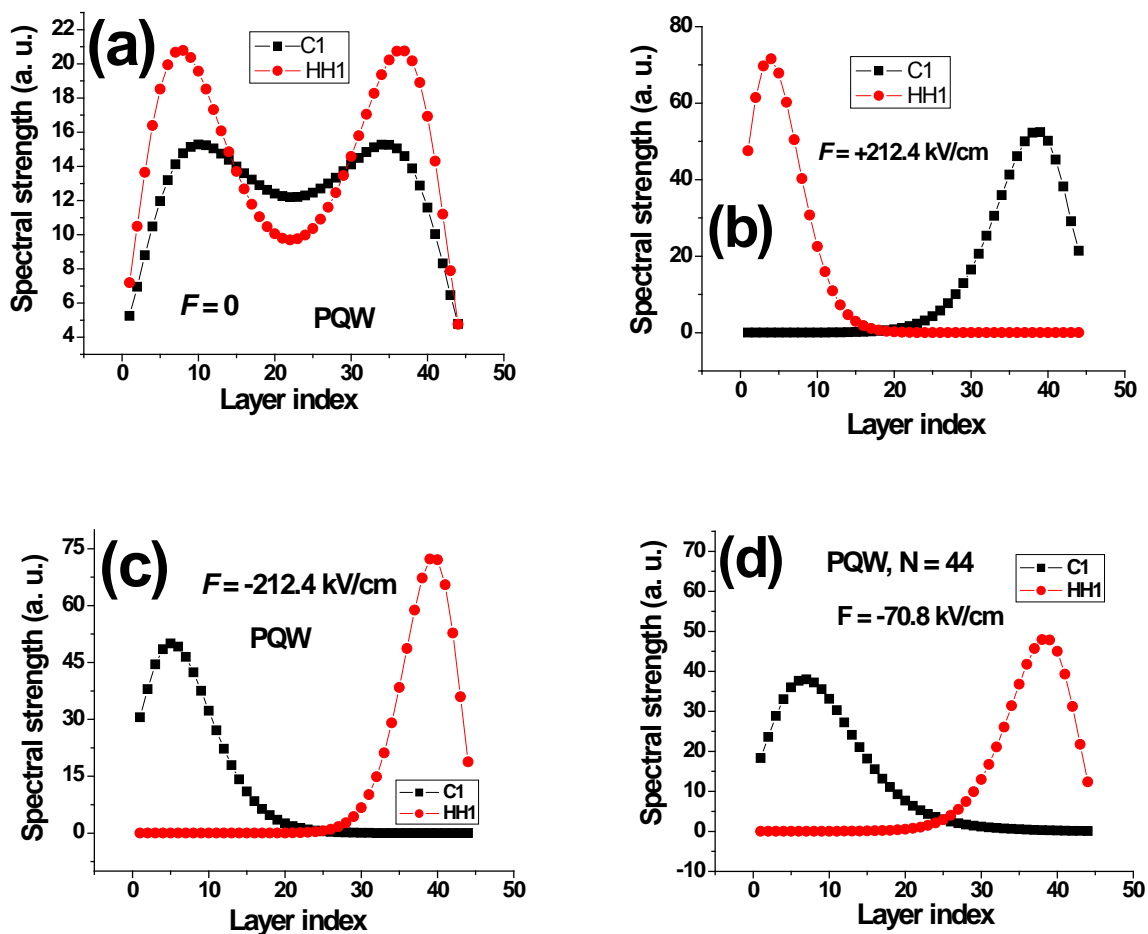
електрично поле отместванията на Щарк на енергиите на преход за трите QWs нарастват по абсолютна величина, но по различен начин в зависимост от концентрационния профил на Al в QW. И за трите QWs: при по-голямо поле нарастването е по-голямо за  $\Delta E(C1-HH1)$  и  $\Delta E(C1-LH1)$ , отколкото за  $\Delta E(C2-HH2)$ . Нарастването на  $\Delta E(C1-HH1)$  е по-бързо от това на  $\Delta E(C1-LH1)$ . Отместванията на Щарк за енергиите на преход  $\Delta E(C1-HH1)$ ,  $\Delta E(C1-LH1)$  (виж фиг. 2a и 2b) са най-големи за PQW, а най-малки за LQW. За Щарк отместването на  $\Delta E(C2-HH2)$  за трите от пресметнатите QWs (LQW, RQW и PQW - виж фиг. 2c) наблюдаваме точно обратната зависимост на показаната на фиг. 2a и 2b, а именно тя намалява по реда съответно LQW, RQW и PQW. С други думи (фиг. 2c), то (Щарк отместването на  $\Delta E(C2-HH2)$ ) е най-силно повлияно от полето  $F$  в LQW.



Фиг. 3. Пространствените разпределения за LQW ( $N = 44$  MLs) на общата спектрална сила за първите свързани състояния C1 (черни квадрати) и HH1 (червени кръгчета), съответно в зоната на проводимост и във валентната зона без (a) и в присъствието (b, c и d) на постоянно електрическо поле  $F$ . Полето на фигури (b), (c) и (d) е съответно  $F = +212.4$  kV/cm;  $F = -212.4$  kV/cm и  $F = -141.6$  kV/cm.

Ние сме изчислили пространствените разпределения на спектралната сила за всяко състояние в ямата и неговите орбитални компоненти във всички изследвани QWs, без и с приложено  $F$ . На фигури 3, 4 и 5 са показани пространствените разпределения на общата спектрална сила за първите свързани състояния C1 и HH1, съответно в зоната на проводимост и във валентната зона, без (a) и в присъствието (b, c и d) на постоянно електрическо поле  $F$  за QWs с  $N = 44$  MLs. Полето на фигури (b) и (c) е максималното прилагано при пресмятанятия поле  $F$ , съответно  $F = +212.4$  kV/cm и  $F = -212.4$  kV/cm. Полето на фигури (d) е по-малко от максимално прилаганото при пресмятанятия поле  $F$ , и е съответно равно на  $F = -141.6$  kV/cm,  $F = -70.8$  kV/cm и  $F = -140.8$  kV/cm, за съответно фиг.3, 4 и 5. И двете разпределения, на C1 и HH1, за всички изследвани и показани тук QWs (с еднаква ширина), имат пълно припокриване на амплитудите си при поле нула. И двете разпределения, на C1 и HH1, за всички изследвани и

показани тук QWs (с еднаква ширина), имат изместване на амплитудите си в същата посока, в присъствието на електрическо поле, но изместването на параболичната QW (PQW) е най-голямо, отколкото за RQW и за линейната QW (LQW), което е резултат от разликата в профилите им на концентрация. Второто по големина изместване е на RQWs, а най-малко изместване на амплитудите имат LQWs.



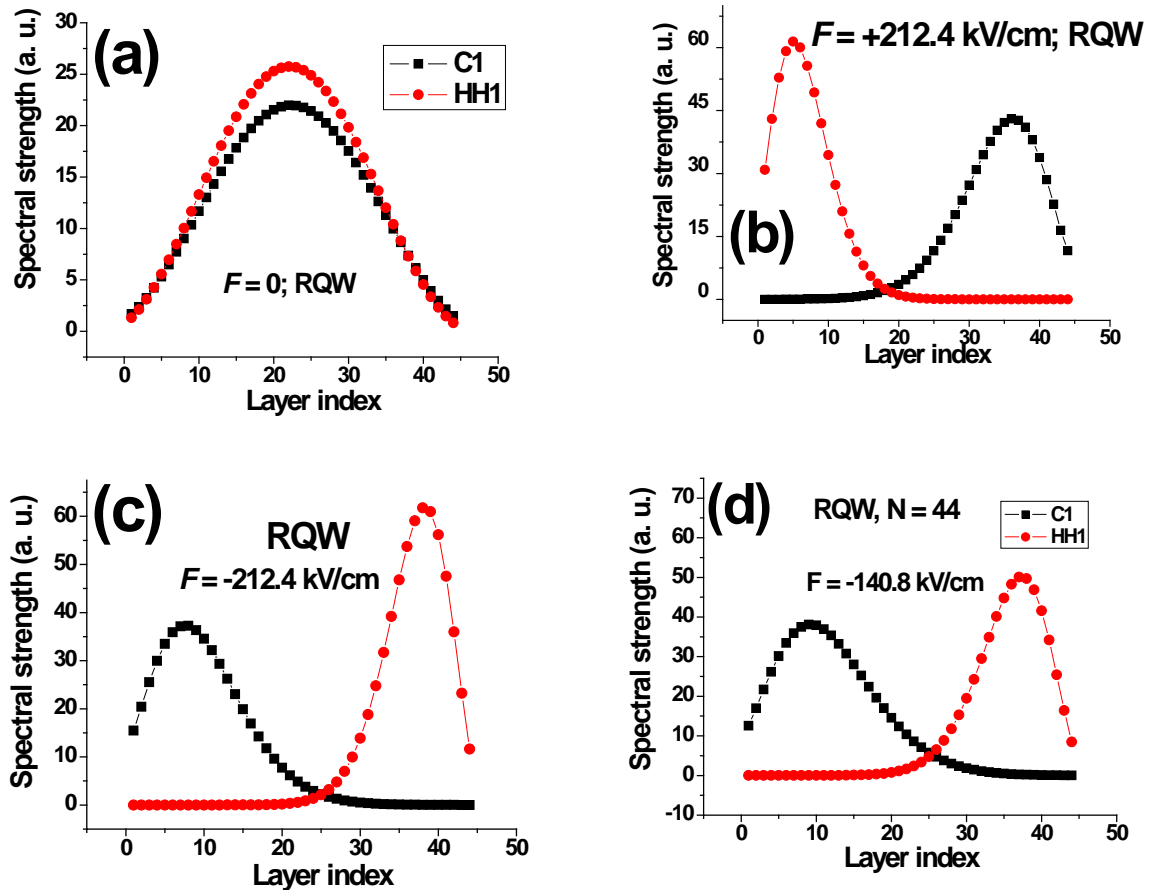
Фиг. 4. Пространствените разпределения за PQW (44 MLs) на общата спектрална сила за първите свързани състояния C1 (черни квадрати) и HH1 (червени кръгчета), съответно в зоната на проводимост и във валентната зона без (a) и в присъствието (b) и (c) на постоянно електрическо поле  $F$ . Полето на фигури (b), (c) и (d) е съответно  $F = +212.4$  kV/cm,  $F = -212.4$  kV/cm и  $F = -70.8$  kV/cm.

От фигурите 3, 4 и 5 се вижда, че за QWs с ширини 44 MLs се достига критичната стойност на  $F$  (виж фиг. 3c, 4b, 4c, 4d, 5b, 5c и 5d). Критичната стойност на електричното поле е тази стойност на  $F$ , при която интензитетът на оптичния преход клони към нула, поради липса на пространствено припокриване между състоянията. От фиг. 3b се вижда, че за LQW с ширина 44 MLs не се достига критичната стойност на  $F$ . От фиг. 3d се вижда, че за LQW с ширина 44 MLs не се достига критичната стойност на  $F$ , при  $F = -141.6$  kV/cm.

От нашите пресмятания се вижда, че критичната стойност на  $F$  се достига най-бързо при PQW, т.е. при 70 kV/cm за PQW нямаме вече припокриване. Докато при това поле, т.е. при 70 kV/cm за RQW и за LQW все още критичната стойност на  $F$  не се достига, все още имаме частично припокриване на разпределенията за C1 и HH1, което за LQW е значително по-голямо отколкото за RQW. Но от фиг. 5b и 5c се вижда, че за RQW критичната стойност на  $F$  се достига при по-високи стойности на електричното поле, по сравнение с PQW с ширина 44 MLs. За показаните LQW се установява, че критичната стойност на  $F$  се достига само за едно от направленията на  $F$ , като отново стойността на това поле е по-висока от тази за PQW. Но за другото отрицателното (наречено от нас) направление на  $F$ , имаме за LQW значително припокриване и при  $F = -141.6$  kV/cm. LQW, с отрицателното направление на  $F$ , има най-добри показатели за приборни приложения, ако съдим по припокриванията на показаните състояния.

Отместванията на Щарк, както и критичната стойност на  $F$  са основни характеристики за избор на QWs за определени приборни приложения. Желателно е отместванията на Щарк да са големи, като при това има припокриване, защото само при съществуващо припокриване приборът ще работи.

При сравнение на пресметнатите от нас данни за обсъдените горе QWs, с наличните експериментални и теоретични данни за RQWs, PQWs и LQWs с близък състав (виж таблици 1 в [21,22]), се установява добро съответствие. Някои несъответствия могат да се дължат на разликите в профилите на концентрацията и на екситонните ефекти (които не са били взети под внимание).



Фиг. 5. Пространствените разпределения за RQW (44 MLs) на общата спектрална сила за първите свързани състояния C1 (черни квадрати) и HH1 (червени кръгчета), съответно в зоната на проводимост и във валентната зона без (a) и в присъствието (b) и (c) на постоянно електрическо поле  $F$ . Полето на фигури (b), (c) и (d) е съответно  $F = +212.4$  kV/cm,  $F = -212.4$  kV/cm и  $F = -140.8$  kV/cm.

### Закljučения и бъдеща работа

Пресметнати са енергиите на основните електронни и дупчести състояния в три типа полупроводникови квантови ями с постоянен и с променлив химичен състав, а именно правоъгълни и параболични, и линейни квантови ями, без и при прилагане на надлъжно постоянно електрично поле. Прилагали сме постоянно електрично поле от  $F = +212.4$  kV/cm и до  $F = -212.4$  kV/cm. Изследван е квантово ограничение Щарк ефект в квантови ями от типа  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  с три ширини (11, 22 и 44 MLs) за всеки тип яма. Пресметнати са също и енергиите на основните оптични преходи с и без поле, както и пространствените им разпределения. Целта на работата е да се сравнят пресметнатите 9 квантови ями, като се сравняват само тези, които са с еднаква ширина, но с различен концентрационен профил без и в присъствието на постоянно електрично поле. Направено е сравнение с наличните експериментални и теоретични данни за такива квантови ями с близък състав. Специално са отразени величината на Щарк отместванията и критичните стойности на електричното поле, които се изчисляват и сравняват в различните видове квантови ями с еднаква ширина. Целта е да се установи кои ями имат по-

добри характеристики на Щарк ефекта, с цел приборни оптоелектронни приложения.

В заключение може да се каже, че подобни като тук пресмятания с метода на силната връзка на квантово ограничения ефект на Щарк в различни QWs с различни концентрационни потенциали помагат да се изучи детайлно влиянието на електричното поле при различни концентрации и интензивности на електричното поле. Това много би помогнало в търсенето на структури с добри показатели на ефекта на Щарк за потенциални приборни приложения или подобряване на вече съществуващите. Това е предмет на бъдеща дейност и такава работа е в ход. Числените пресмятания са в ход и за квантово ограничения Щарк ефект в полупроводникови квантови ями с различен променлив химичен състав (например двойни QWs), което ще позволи да се получи качествена и количествена представа за техните характеристики на Щарк ефекта, с цел търсене на нови приборни приложения.

### Литература:

1. Alferov, Z. I., The double heterostructure concept and its applications in physics, electronics and technology, *Rev. Mod. Phys.*, v. 73, 2001, 769-782.
2. Bastard, G., *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, Les Editions de Physique, 1988.
3. Singh, J., *Semiconductor Devices: An Introduction*, McGraw-Hill Inc., 1994.
4. Di Carlo, A., Microscopic theory of nanostructured semiconductor devices: beyond the envelope-function approximation, *Semicond. Sci. Technol.*, v. 18, 2003, R1-R31.
5. Miteva, A., V. Stoyanova, On Some Experimental Studies of the Quantum Confined Stark Effect in Semiconductor Nanostructures, Ninth Scientific Conference with International Participation, SES 2013, Proceedings, 2014, ISSN 1313 – 3888, 530-535.
6. Miteva, A., V. Stoyanova, Quantum-Confined Stark Effect in Semiconductor Nanostructures and Its Device Applications, Ninth Scientific Conference with International Participation, SES 2013, Proceedings, 2014, ISSN 1313 – 3888, 536-541.
7. Vlaev, S. J., A. M. Miteva, D. A. Contreras-Solorio, V. R. Velasco, Stark shift effects in rectangular and graded gap quantum wells *Surf. Sci.* **424**, 1999, 331–339.
8. Vlaev, S. J., A. M. Miteva, D. A. Contreras-Solorio, V. R. Velasco, Stark effect in diffused quantum wells, *Superlattice Microst.* **26**, 1999, 325–332.
9. Miteva, A. M., S. J. Vlaev, V. T. Donchev, L. M. Gaggero-Sager, Quantum confined Stark effect in n-type delta-doped quantum wells, *Rev. Mex. Fis. S* **53**, 2007, 74–77.
10. Miteva, A. M., S. J. Vlaev, V. Donchev, Stark Effect in p-type Delta-doped Quantum Wells, *Progress In Electromagnetics Research Letters*, ISSN1937-6480; Vol. 2, 2008, 45-52.
11. Miteva, A. M., S. J. Vlaev, Electric field influence on the electronic states of digital versus analog graded –gap quantum wells, *Nanoscience&Nanotechnology*, v. 9, eds. E. Balabanova, I. Dragieva, Heron Press, Sofia, 2009, ISSN: 1313-8995, 21-23.
12. Ramírez-Morales, A., J. C. Martínez-Orozco, I. Rodríguez-Vargas, Quantum confined Stark effect in Gaussian quantum wells: A tight-binding study In AIP Conference Proceedings, edited by Isaac Hernández-Calderón, and Mohamed Henini, vol. 1598, no. 1, AIP, 2014, 150-153.
13. Polland, H.-J., L. Schultheis, J. Kuhl, E. O. Gobel, C. W. Tu, In: *Ultrafast Phenomena* (Ed. G. R. Fleming and A. E. Siegmann), Berlin, Springer Verlag, 1986, 234 - 237.
14. Polland, H.-J., L. Schultheis, J. Kuhl, E. O. Gobel, C. W. Tu, *Phys. Rev. Lett.*, 23, 1985, No 23, 2610 - 2613.
15. Chen, W., T. G. Andersson, S. Wang, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 33, 1994, No 1B, 896 - 899.
16. Nishi, K., T. Hiroshima, *Appl. Phys. Lett.*, 51, 1987, No 5, 320-322.
17. Ishikawa, T., K. Tada, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 28, 1989, No 11, L1982-L1984.
18. Hiroshima, T., K. Nishi, *J. Appl. Phys.*, 62, 1987, No 8, 3360-3365.
19. Ishikawa, T., S. Nishimura, K. Tada, Quantum-confined Stark effect in a parabolic-potential quantum well, *Jpn. J. Appl. Phys.* 29, 1990, 1466-1473.
20. Chen, W.Q., S. M. Wang, T. G. Andersson, J. Thordson, *Phys. Rev. B*, 48, 14264, 1993-I.
21. Miteva, A., 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, 1998, 69-72.
22. Vlaev, S., A. Miteva, V. Donchev, Electronic states in graded composition quantum wells under a constant electric field, in "Advanced Electronic Technologies and Systems Based on Low-Dimensional Quantum Devices", M. Balkanski and N. Andreev (eds.), 1998, Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 55-58 [ NATO ASI 3 HIGH TECH 42: 55-58, 1997 ]
23. García-Moliner, F., V. R. Velasco, *Theory of Single and Multiple Interfaces. The Method of Surface Green Function Matching*, World Scientific, Singapore, 1993.
24. Vlaev, S., V. R. Velasco, F. García-Moliner, *Phys. Rev. B* **49**, 1994, 11222–11229.
25. Vogl, P., P. H. Hjalmarsen, J. D. Dow, *J. Phys. Chem. Solids* **44**, 1983, 365–378.
26. M. Graf, P. Vogl, *Phys. Rev. B* **51**, 1995, 4940–4949.