поля $\sim 10^5$ В/см, его частоте $\sim 10^{14}$ с$^{-1}$ (лазер на CO_2) величина $a \sim 10^{-7}$ см. Трактовка дефекта в δ-слое как дыры в заряженной плоскости возможна при $\pi R^2 N \gg 1$, где N — концентрации δ-легирования; если $N \sim 10^{13}$ см$^{-2}$, то $R \gg 10^{-6}$ см. Характерное значение $\varkappa \sim 10^6$ см$^{-1}$. Оказывается, что в выбранном интервале функция $\varphi_0(|z|)$ с точностью до нескольких процентов зависит лишь от одного параметра $\gamma = \varkappa^2 a R$. Мы оценили расстояние ($|z_0|$), на котором $\varphi_0(|z_0|)$ превышает на порядок значение фона — потенциала идеального δ-слоя. При $\gamma = 0.1$, 1, 10 величина $\varkappa |z_0| \simeq 15$, 10, 7 соответственно.

В случае слабого ВЧ поля ($\varkappa a \ll 1$)

$$\varphi_0(|z|) = \frac{2\pi\sigma}{\varepsilon_0 \varkappa}\left(1 + \frac{a^2 \varkappa |z|}{R^2}\right)\exp(-\varkappa|z|) + \frac{\pi R^2 a^2 \sigma}{2\varepsilon_0}\left[-\frac{4|z|}{R^4} + \frac{2\sqrt{\pi}}{R^3}\left(1 + \frac{2z^2}{R^3}\right) \times \right.$$

$$\left. \times \exp\left(\frac{z^2}{R^2}\right)\operatorname{erfc}\left(\frac{|z|}{R}\right)\right] - \frac{\pi^{3/2} R \sigma}{\varepsilon_0}\left[1 + \left(\frac{a}{R}\right)^2\left(1 + \frac{2z^2}{R^2}\right)\right]\exp\left(\frac{\varkappa^2 R^2}{4} + \frac{z^2}{R^2}\right) \times$$

$$\times \operatorname{erfc}\left(\frac{\varkappa R}{2} + \frac{|z|}{R}\right), \tag{4}$$

где

$$\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_x^\infty \exp(-t^2)\,dt.$$

При $|z| \gg R$ первое и третье слагаемые в (4) экспоненциально убывают [$\sim \exp(-\varkappa|z|)$]. Второе слагаемое ведет себя неэкспоненциальным образом и принимает вид $\pi R^2 a^2 \sigma / (\varepsilon_0 |z|^3)$, что совпадает с соответствующим результатом для уединенной точечной дыры.

Аналогичные результаты получаются и в случае, когда вектор напряженности ВЧ поля лежит в плоскости δ-слоя ($\mathbf{a} \perp OZ$). При этом на больших расстояниях ($|z| \gg R$) $\varphi_0(|z|) \simeq -\pi R^2 a^2 \sigma / (2\varepsilon_0 |z|^3)$.

Список литературы

[1] Херман М. Полупроводниковые сверхрешетки. М., 1989. 240 с.
[2] Lee K. J., Smith T. P., Arnot H., Knoedler C. M., Hong J. M., Kern D. P., Laux S. E.// J. Vac. Sci. Techn. 1988. V. B6. N 6. P. 1856—1860.
[3] Koch F., Zrenner A. // Mater. Sci. Eng. 1988. V. B1. N 3-4. P. 221—227.
[4] Балкарей Ю. И., Эпштейн Э. М. // ФТТ. 1972. Т. 14. В. 3. С. 741—745.
[5] Эпштейн Э. М., Шмелев Г. М., Цуркан Г. И. Фотостимулированные процессы в полупроводниках. Кишинев, 1987. 168 с.
[6] Балкарей Ю. И., Эпштейн Э. М. // ФТП. 1972. Т. 6. В. 9. С. 1807—1809.

Волгоградский государственный
педагогический институт им. А. С. Серафимовича

Получено 23.01.1991
Принято к печати 25.02.1991

ФТП, том 25, вып. 6, 1991

РАСЧЕТНЫЕ АСПЕКТЫ ОПТИМИЗАЦИИ ВАРИЗОННЫХ СЛОЕВ ПО ВЫХОДУ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ

Шмаков С. Л.

Варизонные слои, создаваемые на основе пространственно неоднородных твердых растворов полупроводников с различными значениями ширины запрещенной зоны, обладают рядом ценных в техническом отношение свойств. Так, в работах [1-4] было обнаружено и теоретически обосновано увеличение интегрального выхода как фото-, так и катодолюминесценции по сравнению с гомозонным полупроводником с теми же рекомбинационными параметрами.

Показано, что это обусловлено затягиванием неосновных носителей заряда встроенным квазиэлектрическим полем вглубь и уменьшением поверхностных безызлучательных рекомбинационных потерь. Авторы работали с линейной зависимостью ширины запрещенной зоны от координаты, дающей возможность выписать решение диффузионно-дрейфового уравнения в явном виде. Вместе с тем следует заметить, что современная техника эпитаксии позволяет создавать широкое разнообразие концентрационных профилей варизонных слоев [5]. Было бы желательно уметь прогнозировать тот профиль, который соответствует максимальному выходу люминесценции. Этот вопрос и является предметом настоящей статьи.

Рассмотрим одномерный (по оси OX) варизонный слой n-типа, расположенный между плоскостями $x=0$ и $x=X$, причем правее последней плоскости находится полубесконечный гомозонный кристалл, в котором все интересующие нас параметры [коэффициент диффузии дырок D, коэффициент поглощения света или потока генерирующих электронно-дырочные пары частиц α, время жизни дырок относительно излучательной рекомбинации τ_i и общее время их жизни $\tau=(\tau_i^{-1}+\tau_{\text{non } i})^{-1}$] не зависят от координаты и могут быть обозначены, например, $D\ (X)$. В варизонном слое, наоборот, существует зависимость этих величин, как и ширины запрещенной зоны E_g, от координаты x. Необходимо учесть, что интенсивность распространяющегося вдоль оси OX кристалла излучения выражается формулой

$$J\ (x)=J_0 \exp\left(-\int_0^x \alpha\,(x')\,dx'\right). \tag{1}$$

Для $x \geqslant X$ $J\,(x)=J_0' \exp\left[-\alpha\,(X)\,(x-X)\right]$, где $J_0' \equiv J_0 \exp\left(-\int_0^X \alpha\,(x)\,dx\right)$. Следовательно, функция генерации электронно-дырочных пар в гомозонной части имеет вид

$$G_v\,(x)=-\frac{dJ}{dx}=\alpha J_0' \exp\left[-\alpha\,(X)\,(x-X)\right]. \tag{2}$$

Диффузионное уравнение для области $x \geqslant X$ записывается в форме

$$D\ (X)\,\frac{d^2p}{dx^2}-\frac{p}{\tau\,(X)}+\alpha\,(X)\,J_0' \exp\left[-\alpha\,(X)\,(x-X)\right]=0 \tag{3}$$

при граничном условии $p\ (x \to +\infty)=0$. Его решение

$$p\,(x)=p\,(X)\,\exp\left(-\frac{x-X}{L}\right)+\frac{\alpha\,(X)\,\tau\,(X)\,J_0'}{1-\alpha^2\,(X)\,L^2}\left\{\exp\left[-\alpha\,(X)\,(x-X)\right]-\right.$$
$$\left.-\exp\left(-\frac{x-X}{L}\right)\right\}, \tag{4}$$

где $p\ (x)$ — концентрация дырок, $L=[D\ (X)\ \tau\ (X)]^{1/2}$ — их диффузионная длина в отсутствие дрейфа. Отсюда вытекают два следствия:

$$y_2\,(X) \equiv D\,\frac{dp}{dx}\Big|_{x=X}=-\frac{D\,(x)}{L}\,p\,(X)+\frac{J_0'}{1+\alpha^{-1}\,(X)\,L^{-1}}, \tag{5}$$

$$\int_X^\infty \frac{p\,(x)}{\tau_i\,(x)}\,dx=\frac{1}{\tau_i\,(X)}\left(Lp\,(X)+\frac{\tau\,(X)\,J_0'}{1+\alpha\,(X)\,L}\right), \tag{6}$$

последнее выражение пропорционально квантовому выходу люминесценции в гомозонном объеме.

Обратимся к варизонному слою. Введем функцию $\varepsilon\,(x)=\dfrac{E_g\,(x)-E_g\,(X)}{kT}$. Диффузионно-дрейфовое уравнение

$$\frac{d}{dx}\left[D\left(\frac{dp}{dx}+\frac{d\varepsilon}{dx}\,p\right)\right]-\frac{p}{\tau}+G_v=0 \tag{7}$$

преобразуем виду

$$\frac{d}{dx}\left[D\exp(-\varepsilon)\frac{d}{dx}(\exp(\varepsilon)p)\right]-\frac{p}{\tau}+G_v=0, \tag{8}$$

который обязывает ввести две новые функции: $u(x)=\exp[-\varepsilon(x)]$ [ее назовем управлением, причем $u(X)=1$] и $y_1(x)=p(x)/u(x)$. С их учетом

$$\frac{d}{dx}\left(Du\frac{dy_1}{dx}\right)-\frac{u}{\tau}y_1+G_v=0. \tag{9}$$

Левое граничное условие этого уравнения описывает поток дырок через плоскость $x=0$ и связано со скоростями поверхностной рекомбинации S и поверхностной генерации G_s:

$$y_2(0)\equiv Du\frac{dy_1}{dx}\bigg|_{x=0}=Su(0)\,y_1(0)-G_s, \tag{10}$$

а правое совпадает с формулой (5) [отметим, что при $x\geqslant X$ $y_1(x)\equiv p(x)$ и $u(x)\equiv 1$].

В целях перехода к задаче нахождения оптимального управления преобразуем (9) в систему

$$\begin{aligned}\frac{dy_1}{dx}&=\frac{y_2}{Du},\\ \frac{dy_2}{dx}&=\frac{u}{\tau}y_1-G_v\end{aligned} \tag{11}$$

с граничными условиями (5) и (10) [выражение в квадратных скобках из диффузионно-дрейфового уравнения теперь стало новой функцией $y_2(x)$]. Нам нужно варьированием управления $u(x)$ добиться максимального квантового выхода люминесценции, т. е. минимизировать функционал:

$$\int_0^X -\frac{uy_1}{\tau_i}dx-\frac{L}{\tau_i(X)}y_1(X). \tag{12}$$

В его состав не вошла часть формулы (6), зависящая лишь от параметров гомозонной области кристалла, т. е. в каждом конкретном случае являющаяся константой. Если в эксперименте измеряется не выход люминесценции, а какая-то другая интегральная величина, связанная с пространственным распределением неравновесных носителей заряда, то функционал следует записать соответственно иначе. Постановка задачи охватывает все случаи люминесценции, в том числе и с сугубо поверхностным характером возбуждения (радикало-рекомбинационным и низковольтным катодовозбуждением), когда $G_v=0$ и $G_s>0$. Наконец, если желательно учитывать самопоглощение люминесцентного света, то под знак интеграла следует ввести функцию зависимости вероятности выхода фотона наружу от глубины его возникновения.

Придерживаясь принципа максимума работы [6], запишем функцию Гамильтона—Понтрягина

$$H=a_0\frac{uy_1}{\tau_i}+\psi_1\frac{y_2}{Du}+\psi_2\frac{u}{\tau}y_1-\psi_2G_v, \tag{13}$$

где a_0 — некая константа, а ψ_1 и ψ_2 — функции, сопряженные с y_1 и y_2. Для их определения составляется система уравнений

$$\begin{aligned}\frac{d\psi_1}{dx}&=-\frac{\partial H}{\partial y_1}=-a_0\frac{u}{\tau_i}-\psi_2\frac{u}{\tau},\\ \frac{d\psi_2}{dx}&=-\frac{\partial H}{\partial y_2}=-\frac{\psi_1}{Du},\end{aligned} \tag{14}$$

а четыре условия трансверсальности после исключения неизвестных констант дают граничные условия

$$\psi_1(0) \equiv -Du\frac{d\psi_2}{dx}\Big|_{x=0} = -Su(0)\,\psi_2(0),$$
$$\psi_1(X) \equiv -Du\frac{d\psi_2}{dx}\Big|_{x=X} = \frac{D(X)}{L}\psi_2(X) + a_0\frac{L}{\tau_i(X)}. \tag{15}$$

Для удобства перейдем к уравнению

$$\frac{d}{dx}\left(Du\frac{d\psi_2}{dx}\right) - \frac{u}{\tau}\psi_2 - a_0\frac{u}{\tau_i} = 0 \tag{16}$$

с граничными условиями (15). Можно заметить, что a_0 является своего рода масштабом функции ψ_i.

В литературе [7] рекомендуется следующий порядок численного решения задачи оптимального управления. Выбирается начальное управление (логично сопоставить его с постоянным градиентом ширины запрещенной зоны) и решением дифференциальных уравнений находятся функции y_1, y_2, ψ_1, ψ_2. Отыскивается верхняя грань функции Гамильтона—Понтрягина согласно $H'_u=0$, которая соответствует оптимальному управлению

$$u = \left[\frac{\frac{\psi_1}{D}\frac{y_2}{y_1}}{\frac{a_0}{\tau_i}+\frac{\psi_2}{\tau}}\right]^{1/2}, \quad \exp\left(-\frac{\Delta E_8}{kT}\right) \leqslant u \leqslant 1 \tag{17}$$

(если какое-либо конкретное значение u выходит из этого диапазона, то оно приравнивается к той границе, за которую выходит). Получаем новое управление. Итерации повторяются до тех пор, пока значение функционала (12) продолжает уменьшаться.

Среди численных методов решения уравнений типа (9), (16) наше внимание привлек метод конечных элементов [8, 9]. Приведем его основные формулы в применении к нашему случаю (**B**, **N** — функции формы).

Субматрица жесткости (общая для y_1 и ψ_2)

$$\int\limits_{\text{эл}} [\mathbf{B}^T D(x)\,\mathbf{B} + \mathbf{N}^T\tau^{-1}(x)\,\mathbf{N}]\,u(x)\,dx. \tag{18}$$

Граничные условия учитываются прибавлением $Su(0)$ к диагональному элементу матрицы жесткости, соответствующему значению $y_1(0)$, и $D(X)/L$ — к диагональному элементу, отвечающему $y_1(X)$.

Субвектор нагрузки для y_1

$$\int\limits_{\text{эл}} G_v(x)\,\mathbf{N}dx \tag{19}$$

(к первому элементу полного вектора прибавляется G_s, к последнему — $J'_0/1+\alpha^{-1}(X)\,L^{-1}$); если принять во внимание соотношение (2), то

$$\int\limits_{\text{эл}} G_v(x)\,\mathbf{N}dx = \int\limits_{\text{эл}} J(x)\,\mathbf{B}dx - J(x)\,\mathbf{N}\,|_{\text{эл}}. \tag{20}$$

Субвектор нагрузки для ψ_2

$$-\int\limits_{\text{эл}} \frac{u(x)}{\tau_i(x)}\,\mathbf{N}dx \tag{21}$$

[a_0 положено равным единице; из последнего элемента полного вектора вычитается $L/\tau_i(X)$].

Заметим, что результаты вычисления $u(x)$ не изменятся при одновременном масштабировании функции $G_v(x)$ и параметров G_s и J'_0.

Описанный алгоритм был запрограммирован для PC IBM на языке Турбо-Си. Использовался вариант метода конечных элементов, в котором с каждым узлом связано два параметра — значение вычисляемой функции в этом узле и значение ее производной (одномерный конечный симплекс-элемент включает в себя два узла и, следовательно, описывается четырьмя параметрами, т. е. функции формы кубичны). Это обеспечивало отсутствие скачков любой из вычисляемых функций на стыке элементов. Варизонный слой разбивался на 10—20 равных элементов, интегрирование велось с помощью 5-точечной квадратурной формулы Гаусса—Лежандра. Программа запускалась со значениями рекомбинационных параметров, взятыми из [1, 2], и произвольной их зависимостью от координаты [экспериментальной зависимости $\tau(x)$ обнаружить в литературе не удалось] и давала качественно приемлемые результаты. При разности значений ширины запрещенной зоны, многократно превышающей kT, порядок функции y_1 на протяжении варизонного слоя претерпевает резкий спад, что обязывает, во-первых, вести расчет с двойной точностью, во-вторых, увеличивать число конечных элементов, снижая перепад на каждом из них. Нежелательны большие различия в порядках между значениями функции y_1 и ее производной, так как они вычисляются из единой системы линейных алгебраических уравнений; для выравнивания порядков можно рекомендовать масштабирование. В некоторых случаях расчеты показывают, что длина варизонного слоя выбрана неудачно и ее следует уменьшить или увеличить. Иногда расчетный градиент ширины запрещенной зоны не может быть реализован технически, учет ограничений на него требует переработки алгоритма.

Программа может быть предоставлена заинтересованным лицам.

Список литературы

[1] Коваленко В. Ф., Пека Г. П., Шепель Л. Г. // ФТП. 1977. Т. 11. В. 11. С. 2084—2088.
[2] Коваленко В. Ф., Пека Г. П., Шепель Л. Г. // ФТП. 1980. Т. 14. В. 7. С. 1350—1354.
[3] Пека Г. П., Токалин О. А., Дряпико Н. К. // ФТП. 1983. Т. 17. В. 6. С. 1087—1092.
[4] Дряпико Н. К., Пека Г. П., Чумак С. М. // ФТП. 1983. Т. 17. В. 11. С. 2013—2017.
[5] Гапоненко В. Н., Лунин Л. С., Лунина О. Д. // Изв. АН СССР. Неорг. матер. 1987. Т. 23. В. 8. С. 1247—1250.
[6] Понтрягин Л. С., Болтянский В. Г., Гамкрелидзе Р. В., Мищенко В. Ф. Математическая теория оптимальных процессов. М., 1976. 392 с.
[7] Васильев Ф. П. Численные методы решения экстремальных задач. М., 1988. 552 с.
[8] Зенкевич О. Метод конечных элементов в технике. М., 1976. 542 с.
[9] Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов. М., 1979. 392 с.

Саратовский государственный
университет им. Н. Г. Чернышевского

Получено 8.10.1990
Принято к печати 28.02.1991

ФТП, том 25, вып. 6, 1991

КВАНТОВЫЙ ВЫХОД ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ $Cd_xHg_{1-x}Te$ ($0.4 < x < 0.74$)

Баженов Н. Л., Иванов-Омский В. И., Ижнин А. И., Смирнов В. А.

Известно, что твердые растворы $Cd_xHg_{1-x}Te$ (КРТ) применяются в качестве детекторов ИК излучения в широком спектральном диапазоне, так как при изменении содержания CdTe и HgTe ширина запрещенной зоны изменяется от 0 до 1.6 эВ. Представляет интерес оценка предельных возможностей этих материалов в качестве источников ИК излучения для перспективных систем связи на основе оптических волокон с низким уровнем потерь, работающих в длинноволновой области спектра.

Ранее в работе [1] была измерена абсолютная интенсивность фотолюминисценции (ФЛ) в КРТ состава $x \sim 0.4$ (с шириной запрещенной зоны $E_g \sim 0.52$ эВ) при $T = 300$ К и было показано, что основным механизмом безызлучательной рекомбинации является оже-рекомбинация, в которую наибольший вклад вно-