

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ «МИСИС»

*На правах рукописи*

**КЛЕММЕР ПАВЕЛ СЕРГЕЕВИЧ**

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЯВЛЕНИЯ РЕЗОНАНСНОГО ТУННЕЛИРОВАНИЯ  
В ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯХ С КВАНТОВЫМИ ЯМАМИ**

Специальность 1.3.8 - физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
кандидат физико-математических наук, доцент,  
старший научный сотрудник ФИАН РАН  
доцент кафедры Теоретической физики и квантовых  
технологий НИТУ «МИСиС»  
Теленков Максим Павлович

Москва - 2025 г.

## Содержание

ВВЕДЕНИЕ .....	4
ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ .....	16
1. Процесс резонансного туннелирования в квантовых ямах.....	16
2. Фотовольтаический эффект в полупроводниковых системах .....	19
3. Экситоны в квантовых ямах.....	25
4. Постановка целей и задач исследования .....	29
ГЛАВА 1. МЕТОД УПРАВЛЕНИЯ ПОЛОЖЕНИЕМ ПОДЗОН В КВАНТОВЫХ ЯМАХ	31
1.1 Введение.....	31
1.2 Описание модели .....	34
1.3 Обсуждение результатов .....	36
1.3.1 Управление положением подзон в КЯ .....	37
1.3.2 Исследование размытия гетерограниц на положение подзон в КЯ .....	39
1.3.3 Отработка алгоритма подбора конфигурации встраиваемых барьеров .....	40
1.3.4 Оценка эффективности поглощения и темпов оптической генерации .....	42
1.3.5 Использование метода в фотоэлектрических приложениях .....	47
1.3.5 Экспериментальная проверка исследуемого метода .....	49
1.4 Выводы по главе.....	53
Приложение 1.1 .....	56
Приложение 1.2 .....	58
Приложение 1.3 .....	59
ГЛАВА 2. ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ ЭКСИТОНОВ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ СО ВСТРОЕННОЙ СЕРИЕЙ ТОНКИХ ТУННЕЛЬНО-ПРОЗРАЧНЫХ БАРЬЕРОВ .....	61
2.1 Введение.....	61
2.2 Модель расчета экситонных состояний.....	63
2.3 Исследованные структуры .....	65
2.4 Обсуждение результатов .....	67
2.5 Выводы по разделу .....	76
Приложение 2.1 .....	78
Приложение 2.2 .....	80
Приложение 2.3 .....	82
Приложение 2.4 .....	84
ГЛАВА 3. ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО И ДЫРОЧНОГО РЕЗОНАНСНО- ТУННЕЛЬНЫХ КАНАЛОВ НА ФОТОПОВОДИМОСТЬ.....	88

3.1 Введение.....	88
3.2 Дизайн резонансно-туннельных структур из квантовых ям.....	90
3.3 Описание модели кинетики .....	92
3.4 Обсуждение результатов .....	94
3.5 Выводы по главе.....	100
Приложение 3.1 .....	102
Приложение 3.2 .....	104
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	107
ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ .....	108
СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ.....	110

## ВВЕДЕНИЕ

### Актуальность темы исследования

Диссертационная работа посвящена изучению фотопроводимости в системе квантовых ям во внешнем электрическом поле р-і-п перехода [1-7,9-15]. Основная задача заключается в изучении возможности извлечения носителей из глубоких квантовых ям в непрерывный спектр. В качестве механизма для такого извлечения используется процесс резонансного туннелирования [4,6-9]. Помимо фундаментального интереса имеется прикладной характер работы, в частности для фотоэлементов и фотоприемников [1-3].

В качестве основной задачи, ставится разработка модельной резонансно-туннельной структуры на основе последовательности квантовых ям, для обеспечения эффективного выноса фотоносителей в непрерывный спектр. В работе проведено исследование метода управления положениями подзон размерного квантования в квантовых ямах путем введения серии тонких туннельно-прозрачных барьеров в объём квантовых ям [4-7]. Необходимость управления уровнями размерного квантования в квантовых ямах является важным в ряде оптических и оптоэлектронных приложений [2,4-7,9-15], в частности, в фотовольтаических приложениях квантовых ям.

Введение глубоких квантовых ям в активную область р-і-п фотоэлектрического элемента является эффективным способом расширения спектра поглощения в длинноволновую область [3-6,9-11]. Однако такие приложения сталкиваются с проблемой, связанной с эффективным извлечением фотогенерированных носителей из глубоких квантовых ям в непрерывный спектр. Разработка метода, обеспечивающего быстрое и эффективное извлечение этих носителей, является ключевым аспектом для повышения эффективности фотоэлектрических элементов. Для извлечения носителей можно воспользоваться процессом резонансного туннелирования в последовательности квантовых ям [4,9]. Один из ключевых аспектов для реализации эффективного процесса извлечения носителей из глубоких квантовых ям в непрерывный спектр - это обеспечение резонансного согласования нижних подзон по всей последовательности квантовых ям в электрическом поле р-і-п перехода [4,5,9]. В таких структурах фотовозбужденные носители туннелируют последовательно от ямы к яме, что позволяет им выходить в конечном итоге в непрерывный спектр. Кроме того, изменяя ширину барьеров между соседними квантовыми ямами, можно существенно уменьшить времена туннелирования и, тем самым, обеспечить более высокую эффективность выноса носителей [4].

Для достижения резонансного согласования основных подзон в пределах всей резонансно-туннельной структуры крайне важно учитывать падение напряжения, которое

возникает под действием электрического поля, создаваемого p-i-n-переходом. Это напряжение порождает градиент электрического потенциала, распределённого между соседними квантовыми ямами, который может приводить к смещению уровней размерного квантования в квантовых ямах. Для того чтобы эффективно регулировать расположение самых низких подзон размерного квантования в каждой квантовой яме и обеспечить их согласование с энергетическими уровнями соседних ям, необходимо иметь возможность прецизионного управления нижним уровнем энергии во всём диапазоне, начиная от дна наиболее глубоких квантовых ям и заканчивая уровнями, находящимися близко к непрерывному спектру [5].

Однако реализация таких методов сопряжена с рядом технических трудностей, обусловленных как инженерными ограничениями, так и со сложностями точной настройки межямного взаимодействия. Это особенно актуально для структур, где требуется высокая точность положения отдельных подзон для обеспечения эффективного туннельного переноса носителей заряда. Стандартные подходы к варьированию энергетических уровней сталкиваются с ограничениями технологии изготовления, такими как малые варьируемые параметры толщины барьеров или квантовых ям. Следовательно, разработка новых инженерных решений, направленных на более точное управление положением подзон квантовых ям, а также параметрами туннельно-прозрачных барьеров, является ключевой задачей для оптимизации характеристик таких систем [5].

В работах [5,6] было предложено управлять положением подзон за счет введения в объем ямы серии тонких барьеров из того же материала. Было продемонстрировано экспериментально и подтверждено численными расчетами, что, меняя конфигурацию барьеров, можно варьировать положение основного уровня энергии в широких пределах ( $\sim 100$  мэВ). Помимо этого, было продемонстрировано, что введение тонких барьеров в квантовые ямы не приводит к их разделению, система квантовая яма и барьеры остается единой, что подтверждается распределение единой волновой функцией. Также, данный метод позволяет осуществлять прецизионное управление положением подзон, не нарушая существенно при этом туннельных и оптических характеристик структуры. Однако в работе [5] метод был протестирован только для двух структур с квантовыми ямами. Поэтому для определения возможностей данного метода требуется проведение более детального и систематического его исследования. В частности, необходимо выяснить возможность плавной перестройки положения подзон в квантовых ямах и реализовать на его основе модельную резонансно-туннельную структуру. Такое актуальное исследование проведено в рамках данной диссертационной работы, направленное на разработку методики построения резонансно-туннельных структур, встроенных в p-i-n переход.

Далее, в работе [4] была высказана идея, что для обеспечения эффективного выноса носителей заряда из глубоких квантовых ям необходимо предусмотреть резонансно-туннельные каналы, как для электронов, так и для дырок. При рассмотрении поведения фотовозбужденных дырок в подобных структурах можно заметить, что дырки будут иметь тенденцию к накоплению в самой глубокой яме серии, поскольку единственным каналом выхода для них является их рекомбинация с электронами. Накопление дырок должно приводить к увеличению скорости электронно-дырочной рекомбинации, что будет снижать эффективность преобразования. Поэтому в данной работе мы применяем данный метод к последовательному набору из квантовых ям GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As, реализуя резонансно-туннельное согласование нижних подзон, как для электронной, так и для дырочной подсистем. Для этого выполнены численные расчеты положения подзон для различных конфигураций встроенных барьеров, реализующих режим резонансного туннелирования в последовательном наборе из квантовых ям GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As. Посредством численного эксперимента проведено исследование фотостимулированного транспорта и определена эффективность извлечения для модельной структуры.

Исследование экситонов в квантовых ямах стало одной из важных задач, возникших в ходе выполнения данной работы. Особый интерес для фундаментальной физики представляет изучение влияния тонких туннельно-прозрачных барьеров на энергию связи экситонов в таких структурах. Данная проблема не только имеет значительный теоретический аспект, но и оказалась ключевой для корректной интерпретации экспериментальных спектров фотолюминесценции и их сопоставления с вычисленными энергетическими уровнями для электронов и дырок. В двумерных электронных системах расчёт энергии экситонов традиционно осуществляется с использованием моделей Френкеля [52] и Ванье-Мотта [54,55]. Эти подходы предполагают разделение переменных на системы для центра масс и относительного движения [59,73], что позволяет упростить уравнение Шредингера для экситона. Однако в нашем случае наличие тонких туннельно-прозрачных барьеров, сочетающееся с широкой (~25 нм) квантовой ямой, делает применение стандартных приближений затруднительным, а порой невозможным. Данное обстоятельство требует перехода к более точным методам, подразумевающим прямое численное решение уравнения Шредингера для экситонных состояний.

В рамках настоящего исследования был проведён детализированный расчёт энергии связи экситона (для 1s состояния), а также энергии самого экситона в квантовых ямах со встроенными тонкими барьерами. Для этого применён метод конечно-разностной дискретизации, который зарекомендовал себя как надёжный инструмент для задач такого

рода [76]. Полученные данные позволили провести количественный анализ экспериментальных спектров фотолюминесценции, обеспечив согласованную интерпретацию наблюдаемых оптических характеристик. Таким образом, разработанный подход не только уточняет физическую картину взаимодействия экситонов в сложных структурах с тонкими барьерами, но и способствует дальнейшему совершенствованию методов расчёта экситонных спектров.

**Цели диссертационной работы:**

- 1) Реализация метода обеспечения эффективного выноса носителей из квантовых ям во внешнем электрическом поле p-i-n перехода.

**Задачи диссертационной работы:**

- 1) Исследование возможностей метода по управлению положениями уровней размерного квантования и обеспечения плавной перестройке спектра в квантовых ямах;
- 2) Разработка модельной резонансно-туннельной структуры состоящей из последовательности квантовых ям на основе исследуемого метода;
- 3) Сравнение разработанной теории резонансно-туннельной структуры из квантовых ям с экспериментальными данными для исследования предложенного метода на предмет точности управления подзонами и возможной реализации на практике квантовых ям с введенной серией тонких туннельно-прозрачных барьеров;
- 4) Изучение влияния электронного и дырочного резонансно-туннельных каналов на фотопроводимость для резонансно-туннельных структур с квантовыми ямами;
- 5) Определение влияния встроенной серии тонких туннельно-прозрачных барьеров на положение основного уровня и энергию связи экситона в квантовых ямах AlGaAs/GaAs.

**Научная новизна работы:**

- 1) Представлена методика управления положениями уровней размерного квантования посредством введения в квантовую яму серии тонких туннельно-прозрачных барьеров, не нарушая существенным образом при этом туннельных и оптических характеристик структуры.
- 2) Рассчитана модельная структура из квантовых ям, позволяющая реализовать режим резонансного туннелирования в электрическом поле p-i-n перехода как для электронов, так и для дырок.
- 3) Проведено теоретическое исследование кинетики фотогенерированных носителей заряда в резонансно-туннельных структурах из квантовых ям. Показано, что в таких структурах можно реализовать эффективный вынос фотогенерированных

носителей заряда из квантовых ям в непрерывный спектр. Показано, что для эффективного извлечения фотогенерированных носителей заряда из квантовых ям в непрерывный спектр принципиальную роль играет резонансно-туннельный канал выноса для дырок.

- 4) Проведено теоретическое исследование основного уровня энергии экситонов в квантовых ямах с тонкими туннельно-прозрачными барьерами. Получены зависимости энергии связи экситонов от количества и конфигурации введённых барьеров. Обнаружено, что энергия связи экситонов немонотонным образом зависит от степени, занимаемой вводимыми барьерами в квантовой яме – сначала наблюдается рост, а затем падение энергии связи. Результаты расчетов получили экспериментальное подтверждение.

**Теоретическая и практическая значимость работы.** Представлена методика по управлению нижним уровнем размерного квантования в квантовых ямах в широком диапазоне - практически от дна квантовой ямы вплоть до уровня непрерывного спектра. Путем систематического исследования метода продемонстрирована возможность прецизионного управления положением подзоны в квантовых ямах путем введения серии туннельно-прозрачных барьеров заданной конфигурации. Продемонстрирована возможность управления степенью локализации волновых функций подзон в квантовой яме, посредством изменения конфигурации распределения барьеров в объёме квантовой ямы. Важно отметить, что предложенный метод характеризуется высокой точностью и не вносит значительных изменений в целостность системы «квантовая яма – потенциальные барьеры». При этом волновая функция системы сохраняет свою непрерывность, что минимизирует воздействие на туннельные и оптические характеристики исследуемой структуры. На основе методики разработаны модельные резонансно-туннельные структуры, состоящие из последовательности квантовых ям GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As с резонансным согласованием подзон, помещённые в p-i-n переход. Продемонстрирована возможность реализации на практике модельных гетероструктур с квантовыми ямами GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As, выращенных методом МЛЭ, реализующих исследуемый метод. Представленный метод инженерии состояний в квантовых ямах может быть использован для конструирования приборов оптоэлектроники, в частности, в фотовольтаических приложениях с квантовыми ямами.

**Методология и методы исследования.** Исследование метода по управлению положениями подзон в квантовых ямах проводилось с использованием комбинации теоретического моделирования, экспериментального исследования и их комплексного анализа. Энергии электронных и дырочных подзон в исследованных структурах с

квантовыми ямами GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As рассчитывались путем решения уравнения Шрёдингера методом огибающей в параболическом приближении. Для решения одномерного уравнения Шрёдингера для квантовой ямы использовали граничные условия Бен Даниэля-Дьюка. Для расчета уровней энергий в квантовых ямах для электронов и дырок использовали параметры материалов GaAs и Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Для расчета дырочных подзон воспользовались Гамильтонианом Латтинджера, который представляет собой теоретическую основу, используемую для описания зонной структуры полупроводников в параболическом приближении валентной зоны, таких как GaAs. Использовали параболический закон дисперсии для валентной зоны с учетом эффективных масс для лёгких и тяжёлых дырок, выраженных через параметры Латтинджера ( $\gamma_1 = 6.85$ ,  $\gamma_2 = 2.1$ ,  $\gamma_3 = 2.9$ ) для материалов GaAs и Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As. Для расчета стационарного состояния экситона решалось 3-хмерное уравнение Шрёдингера с параболическим законом дисперсии методом конечно-разностной дискретизации 2-го порядка. Энергию связи экситона определяли разностью энергий стационарного состояния и одночастичных состояний для электрона и тяжелой дырки.

Рост модельных гетероструктур с квантовыми ямами GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As осуществлялся методом МЛЭ на установке Riber Epineat 3-5. Спектры низкотемпературной люминесценции структур измерялись при температуре 5К на установке SP-2356 с охлаждаемым матричным детектором PIXIS-100 при оптическом возбуждении излучением He-Ne лазера (0.63 мкм). Измерения ПЭМ проводились с использованием микроскопа Close Osiris FEI, работающего при ускоряющем напряжении 200 кВ. Рентгеновские дифракционные картины были получены с использованием дифрактометра Panalytical X-Pert MRD с гибридным монохроматором и первичной щелью 0,1 мм.

#### **Основные результаты работы:**

1. Разработана методика конструирования резонансно-туннельных структур из квантовых ям, обеспечивающая эффективное извлечение носителей в непрерывный спектр благодаря резонансно-туннельным каналам выноса, как для электронов, так и для дырок. Методика основана на управлении уровнями размерного квантования посредством введения в квантовые ямы серии тонких туннельно-прозрачных барьеров определенной конфигурации. Подготовлена технологическая карта модельной структуры с квантовыми ямами Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As/GaAs.
2. Исследована кинетика фотогенерированных носителей заряда в резонансно-туннельных структурах с квантовыми ямами. Продемонстрировано, что в таких

структурах можно реализовать эффективный вынос фотогенерированных носителей заряда из квантовых ям в непрерывный спектр.

3. Установлены зависимости фототока от темпа генерации, интенсивности рекомбинации и времён туннелирования электронов и дырок.
4. Показано, что для реализации фотовольтаического преобразования в резонансно-туннельной структуре, встроенной в р-і-п элемент, необходимо одновременно обеспечить резонансно-туннельный транспорт, как для электронов, так и для дырок.
5. Проведено теоретическое исследование уровня энергии экситонов в квантовых ямах с тонкими барьерами. Получены зависимости энергии связи экситонов от количества и конфигурации введённых барьеров. Результаты расчетов получили экспериментальное подтверждение.
6. Проведено исследование влияния на энергию связи экситонов тонких туннельно-прозрачных барьеров различной конфигурации помещенных в квантовую яму.
7. Показано, что энергия связи экситонов немонотонным образом зависит от степени, занимаемой вводимыми барьерами в квантовой яме – сначала наблюдается рост, а затем падение энергии связи.

**Основные положения, выносимые на защиту:**

- 1) Введение тонких барьеров в квантовую яму позволяет контролируемо управлять энергией подзон размерного квантования в широких пределах – от дна квантовой ямы, вплоть до уровня непрерывного спектра.
- 2) Предложен метод обеспечения резонансного согласования в квантовых ямах посредством равномерного введения тонких туннельно-прозрачных барьеров, который позволяет реализовать резонансно-туннельную последовательность из квантовых ям для обеспечения выноса фотоносителей из глубоких квантовых ям.
- 3) Продемонстрирована возможность одновременной реализации резонансно-туннельных каналов выноса электронов и дырок в структуре, с квантовыми ямами помещенной в р-і-п элемент.
- 4) Для эффективного извлечения фотогенерированных носителей заряда из квантовых ям в непрерывный спектр принципиальную роль играет канал резонансно-туннельного извлечения дырок. При уменьшении эффективности дырочного канала также падает и эффективность электронного канала. А при исчезновении дырочного канала электронный фототок также стремится к нулю.

- 5) Энергия связи экситонов немонотонным образом зависит от степени заполнения вводимыми барьерами в квантовой яме – сначала наблюдается рост, а затем падение энергии связи.

#### **Достоверность полученных результатов.**

Достоверность результатов достигалась за счет комплексного подхода, включающего экспериментальную верификацию, теоретическое моделирование структур и сравнение с литературными данными для материалов GaAs и  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ . Достоверность результатов обеспечена строгим контролем параметров структур GaAs и  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ , согласованностью теоретических моделей и полученных экспериментальных данных, статистической значимостью измерений и корреляцией с литературными источниками. Выявленные ограничения не ставят под сомнение основной вывод о повышении эффективности выноса фотоносителей из последовательности квантовых ям помещенных в p-i-n переход, путем резонансного согласования подзон в квантовых ямах реализующих наш подход.

#### **Апробация работы.**

Диссертационное исследование выполнено в процессе проведения совместных исследований на кафедре теоретической физики и квантовых технологий Национального исследовательского технологического университета «МИСИС» и лаборатории терагерцовой спектроскопии отделения твердого тела Физического института им. П. Н. Лебедева РАН. Работа охватывает фундаментальные и прикладные аспекты физики полупроводников, квантовых технологий и нанофизики, опираясь на междисциплинарный подход.

Основные результаты диссертационного исследования были представлены на ряде крупных международных и отечественных научных мероприятий. В частности, они были доложены на международной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2019», проходившей в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова. На международной конференции CMD2020GEFES, объединяющей Европейское физическое общество и Королевское общество физиков Испании, ключевые положения диссертации заслушивались в рамках обсуждения вопросов, связанных с физикой конденсированного состояния вещества. Презентация результатов также состоялась на XXVII Международном симпозиуме «Нанофизика и нанoeлектроника», где был представлен стендовый доклад, посвящённый исследованию характеристик туннельных эффектов в полупроводниковых наноструктурах (Нижний Новгород, 2023). Кроме того, исследование было представлено на IX Международной конференции «Лазерные, плазменные исследования и технологии» (Москва, Национальный

исследовательский ядерный университет «МИФИ», 2023), а также повторно обсуждено на международной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2023» (Московский государственный университет, 2023). Результаты работы нашли отражение в рамках регулярных научных семинаров отделения физики твёрдого тела ФИАН, прошедших в 2021 и 2023 годах, где они вызвали активные дискуссии среди специалистов в области теоретической и экспериментальной физики полупроводников.

**Личный вклад.** Автор проводил моделирование резонансно-туннельных структур с квантовыми ямами, в которых управление уровнями размерного квантования достигалось посредством встраивания туннельно-прозрачных барьеров в объём квантовой ямы. Автор проводил расчёт кинетики фотостимулированного транспорта для резонансно-туннельных структур с квантовыми ямами. Автор совместно с П.Ф. Карцевым проводил моделирование экситонных состояний и определение энергии связи экситонов в квантовых ямах с внесённой серией тонких туннельно-прозрачных барьеров.

Автор выражает благодарность сотрудникам лаборатории терагерцовой спектроскопии твёрдого тела ФИАН им. П.Н. Лебедева: зав. лабораторией Митягину Ю.А. и с.н.с. Теленкову М.П. за постановку задач, обсуждение методов их решения и результатов исследований. Отдельные благодарности автор выражает сотрудникам ФИАН им. П.Н. Лебедева: н.с. отдела твердотельной фотоники Пашкееву Д.А. за осуществление роста структур методом МПЭ, в.н.с. Центра высокотемпературной сверхпроводимости и квантовых материалов им. В.Л. Гинзбурга Мартовицкому В.П. за проведение экспериментальных работ по рентгеноструктурному анализу, с.н.с. лаборатории терагерцовой спектроскопии твёрдого тела Савинову С.А. за проведение измерений спектров низкотемпературной фотолюминесценции. Автор выражает благодарность зав. лабораторией электронной микроскопии Института кристаллографии имени А. В. Шубникова РАН Васильеву А.Л. за проведение микроструктурного анализа выращенных структур. Также, автор выражает благодарность доценту кафедры физики твёрдого тела и наносистем института лазерных и плазменных технологий НИЯУ МИФИ Карцеву П.Ф. за оказание помощи с численными методами расчета для экситонных спектров и энергий связи экситонов для квантовых ям со встроенной серией тонких барьеров.

**Публикации.** По теме диссертационной работы опубликовано 4 работы, из которых: 2 научные статьи в высокорейтинговых научных журналах индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus, 2 материалов научных конференций и семинаров в виде тезисов докладов.

**Структура диссертационной работы.** Диссертация состоит из введения, обзора литературы, трех содержательных глав и заключения. Работа изложена на 116 страницах, включает 36 рисунков, 10 таблиц и список литературы насчитывает 91 наименование.

**Во введении** коротко описана актуальность темы исследования, его цель и научная новизна. Приводится краткое содержание диссертации, а также сформулированы положения, выносимые на защиту, основные результаты, апробация научных результатов и личный вклад автора в работу.

**В литературном обзоре** представлен анализ научных публикаций, посвящённых изучению фотовольтаических эффектов в полупроводниковых структурах, а также исследованию процессов, связанных с использованием квантовых ям в современных фотовольтаических преобразователях. Особое внимание уделено доказательству актуальности исследований в области резонансно-туннельных структур, которые обладают значительным потенциалом для применения в оптоэлектронных устройствах и системах преобразования солнечной энергии. Рассмотрены основные направления изучения физических процессов в таких структурах, включая механизмы туннелирования и взаимодействия электронов с фотонами. Ключевым аспектом обзора являются фундаментальные вопросы, связанные с экситонными эффектами в квантово-размерных системах. Описана физическая природа экситонов, особое внимание уделено их основным характеристикам, в том числе энергии связи, радиусу экситона и зависимости этих свойств от размеров квантовых ям. Эти характеристики экситонов играют важную роль в определении эффективности квантовых структур в фотовольтаических и оптоэлектронных устройствах. Важной частью исследования является анализ теоретических моделей, которые используются для описания экситонных состояний в ограниченных системах. Подробно обсуждаются методы решения уравнения Шрёдингера, применяемые для нахождения стационарных состояний и определения энергии связи экситонов в условиях квантового ограничения. В частности, исследуются аналитические и численные подходы, включая вариационные методы и методы конечных элементов, что позволяет более детально изучить влияние геометрических и физических параметров квантовых ям на их свойства.

**В первой главе** рассматривается разработка модели резонансно-туннельной структуры, базирующейся на методе управления энергетическими подзонами в квантовой яме. Данный метод реализуется посредством равномерного распределения тонких туннельно-прозрачных барьеров с заданной конфигурацией, встроенных в структуру квантовой ямы. Проведён анализ механизма, лежащего в основе метода, с акцентом на возможности варьирования конфигурации барьеров для изменения характеристик

системы. Показано, что применение этого подхода позволяет эффективно управлять положениями подзон квантовой ямы в широком диапазоне, начиная от её дна и вплоть до уровня непрерывного спектра, что открывает перспективы для точной настройки параметров резонансно-туннельных структур. Одной из основных результатов исследования является доказательство того, что внедрение тонких туннельно-прозрачных барьеров не нарушает целостность структуры "квантовая яма – барьеры", которая остаётся единой системой. Это подтверждено анализом распределения единой волновой функции, описывающей всю структуру. Кроме того, было установлено, что введение барьеров не оказывает значительного влияния на параметры туннелирования и коэффициенты оптического поглощения квантовой ямы, что делает метод технологически привлекательным для проектирования фотонных и электрооптических устройств. В работе предложен упрощённый алгоритм выбора конфигурации набора туннельно-прозрачных барьеров, позволяющий достичь заданных значений энергии нижней подзоны в квантовой яме. Методика пригодна для точной настройки энергетических параметров таких структур, что делает её перспективной для применения в разработке высокоэффективных резонансно-туннельных структур в целях создания фотоэлектрических элементов на основе р-і-п переходов. Также проведено экспериментальное исследование предлагаемого подхода. Результаты продемонстрировали высокую точность управления положениями подзон, а также практическую возможность реализации квантовых ям с введённой серией тонких туннельно-прозрачных барьеров.

**Во второй главе** подробно рассматриваются свойства экситонов в квантовых ямах с введёнными сериями тонких туннельно-прозрачных барьеров, что позволяет осуществлять управляемое изменение их электрооптических характеристик. На основе численного решения двухчастичного уравнения Шрёдингера в параболическом приближении была проведена оценка и расчёт основных энергетических состояний и связанных с ними энергий связи экситонов. Методика решения включала использование модели огибающей функции для электронно-дырочных пар, что позволило учесть влияние конфигурации распределённых барьеров на свойства экситонных состояний. Одним из ключевых результатов исследования стало выявление немонотонного характера зависимости энергии связи экситонов от доли объёма квантовой ямы, заполненной туннельно-прозрачными барьерами. Эта зависимость обусловлена конкурирующими эффектами пространственного сужения волновых функций и модифицированной электронной структуры самих экситонов. Анализ демонстрирует, что при определённых параметрах заполнения барьеры могут усиливать локализацию

экситонов за счёт формирования дополнительных потенциальных мини ям, что приводит к увеличению энергии их связи. Однако при превышении критической концентрации барьеров наступает ослабление связи из-за увеличения туннельного просачивания носителей. Для проверки теоретических выводов было проведено экспериментальное исследование, в рамках которого изучены оптические характеристики выращенной структуры GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As с внедрённой серией тонких туннельно-прозрачных барьеров. Эксперименты подтвердили адекватность предложенной модели: измеренные энергии переходов экситонов показали хорошее совпадение с рассчитанными теоретическими значениями, что свидетельствует о высокой точности численного метода и корректности учёта электростатических эффектов. Полученные данные также доказывают, что применение распределённых туннельно-прозрачных барьеров является эффективным инструментом для управления экситонными состояниями в полупроводниковых гетероструктурах.

**Третья глава** посвящена исследованию эффективного извлечения фотогенерированных носителей заряда из глубоких квантовых ям посредством механизма последовательного резонансного туннелирования. Ключевым результатом работы стал вывод о возможной реализации одновременных резонансно-туннельных каналов выхода для электронной и дырочных подсистем. Детальный анализ кинетики модельной структуры, основанный на решении системы балансных уравнений с учётом времён туннелирования и рекомбинационных процессов, продемонстрировал, что подавление резонансного туннелирования дырок приводит не только к исчезновению дырочного фототока, но и к критическому снижению электронной компоненты. Это свидетельствует о сильной корреляции между каналами движения разнотипных носителей, обусловленной электронейтральностью системы и конкуренцией процессов рекомбинации. На основе выявленных закономерностей разработана резонансно-туннельная гетероструктура с последовательностью квантовых ям GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As, параметры которой (ширина ям, высота барьеров и их количество) оптимизированы для обеспечения условий согласования подзон в последовательности квантовых ям, и реализации резонансно-туннельных каналов для электронов и тяжёлых дырок. Проведённая оценка эффективности извлечения фотогенерированных носителей в предложенной резонансно-туннельной структуре показала высокую степень извлечения носителей заряда более 80%. Эти результаты подтверждают перспективность использования процесса резонансного туннелирования для обеспечения эффективной фотоэлектронной экстракции и демонстрируют возможность его применения в оптоэлектронных устройствах.

**В заключении** изложены основные результаты работы.

## ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ

### 1. Процесс резонансного туннелирования в квантовых ямах

Метод последовательного туннелирования представляет собой эффективный подход к описанию электронного транспорта в системах с квантовыми ямами, где проведение тока опосредовано последовательными актами туннелирования между состояниями в соседних ямах, уширенными вследствие внутриямного рассеяния. Такой механизм включает быстрое установление квазиравновесного состояния в рамках каждой ямы за счет рассеяния носителей, после чего происходит относительно медленный туннельный переход между ямами. Существенным упрощением модели является тот факт, что процесс туннелирования между соседними ямами на порядки медленнее процессов внутри каждой отдельной ямы, что позволяет рассматривать внутриямное рассеяние и туннелирование отдельно. В результате можно вычислить распределение плотности состояний в каждой из квантовых ям с учетом внутриямного рассеяния, и затем применять его для расчёта туннельного тока. Этот подход был подробно проработан и применён к моделированию резонансного туннелирования в двойной квантовой яме в ряде исследований [80–82].

Развитие данного подхода получило новый импульс благодаря созданию микроскопической модели электронного транспорта в сверхрешетках, впервые предложенной А. Вакером в сериях его теоретических работ [83, 84]. Предложенная модель основывается на подходе последовательного туннелирования, однако привносит несколько принципиальных изменений, касающихся учета взаимодействий и методов описания состояния системы. В отличие от предположения о внешнем происхождении процессов рассеяния, принятым в ранних моделях, в работах Вакера предполагается, что рассеяние является неотъемлемой частью механизма резонансного туннелирования. Этот процесс формально описывается с привлечением одноэлектронных функций Грина [85], что позволяет более подробно анализировать динамику системы и учитывать её микроскопические особенности. Принципиально важным аспектом работы [83–85] является использование в качестве нулевого приближения не состояний изолированных квантовых ям, как это делалось в большинстве предыдущих исследований, а функций Ванье — математического базиса, более адекватно отражающего особенности сверхрешёточных структур с периодическим потенциалом. Эффективность такого подхода была подтверждена в работе [86]. Переход к функциям Ванье существенно расширяет описательные возможности модели и уменьшает ограничения на условия слабой туннельной связи между ямами, что делает возможным более точное описание

сложных взаимодействий в системе. В частности, это позволяет успешно моделировать проявления резонансного туннелирования, наблюдаемые в сверхрешёточных структурах при различных энергетических и структурных настройках.

В научных исследованиях [4–7, 9] было предложено использование явления резонансного туннелирования для обеспечения выхода фотовозбужденных носителей из квантовых ям в область непрерывного энергетического спектра. В частности, работа [5] детально исследует и предлагает метод эффективного извлечения таких носителей, основанный на резонансном туннелировании в многослойных структурах с квантовыми ямами, интегрированных в активную область  $p$ - $i$ - $n$  фотоэлектрического элемента. В этом подходе фотовозбужденные носители, генерируемые в глубоких квантовых ямах, могут туннелировать через резонансные энергетические уровни последовательности квантовых ям, внося вклад в общий фототок благодаря процессам термического выброса из крайних ям структуры. Ключевая роль в данном процессе отводится явлению резонансного туннелирования, при котором туннельный ток усиливается за счет согласия энергии носителей с разрешенными состояниями в пределах последовательных квантовых ям. Важным преимуществом такого метода является эффективное разделение фотогенерированных носителей и их быстрый вынос из области захвата по сравнению с альтернативными механизмами транспорта. Это делает предложенный метод перспективным для применения в устройствах, предназначенных для преобразования света в электрическую энергию или детектирования излучения.

Основным отличием резонансно-туннельного транспорта от механизма баллистического переноса является характер перемещения носителей. В случае баллистического транспорта движение заряженных частиц происходит без участия процессов рассеяния, обусловленное исключительно сохранением их импульса, тогда как резонансное туннелирование связано с поэтапным туннелированием носителей через потенциальные барьеры за счет квантового эффекта туннелирования. При этом процессы рассеяния на масштабах отдельных квантовых ям либо минимальны, либо отсутствуют вовсе, что также обеспечивает преимущество резонансного механизма в оптимизации фототока.

Эффективное управление энергетическим спектром квантовых ям, включая точное позиционирование уровней размерного квантования от дна потенциальной ямы до границы непрерывного спектра, представляет собой фундаментальную задачу при проектировании резонансно-туннельных структур. Такое управление необходимо для обеспечения согласования подзон в последовательности квантовых ям, что является критическим условием реализации резонансного туннелирования — процесса, при

котором носители последовательно туннелируют без существенных потерь на рекомбинацию или рассеяние. Однако достижение требуемого согласования осложняется зависимостью энергетических уровней от геометрических параметров ям (ширина, высота и конфигурация барьеров), а также внешних факторов, таких как электрическое поле в p-i-n-переходе.

Ключевым аспектом управления является регулировка положения основной подзоны, определяющей туннельные характеристики структуры. Для этого необходимо не только смещение уровня в энергетическом пространстве, но и контроль пространственного распределения волновой функции, поскольку величина туннельного матричного элемента  $M_{ij} = \langle \psi_i | H | \psi_j \rangle$  напрямую зависит от перекрытия волновых функций соседних ям. Оптимизация  $M_{ij}$  требует равномерного распределения амплитуды волновой функции в области барьера, что достигается проектированием симметричных или слабоасимметричных потенциалов. Например, в асимметричных квантовых ямах [22] смещение внутреннего барьера к одному из краёв ямы приводит к локализации волновой функции основной подзоны в узкой мини-яме, что резко снижает  $M_{ij}$  из-за экспоненциального затухания волновой функции в барьере. Экспериментальные измерения [27] для структур GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As с барьером толщиной 4 нм показали, что смещение барьера на 30% от центра ямы уменьшает  $M_{ij}$  на порядок, снижая вероятность туннелирования с  $10^{-2}$  до  $10^{-3}$ .

Авторами в работе [5] проведено исследование общих методов управления уровнями размерного квантования в квантовых ямах, путем изменения ширины и состава квантовых ям, и выявлены технологические сложности, с которыми сталкиваются при реализации подобных резонансно-туннельных структур на практике. Поэтому в данной работе за основу взяли метод, предложенный авторами в работах [4,6,7]. Путем точной настройки конфигурации вводимых в квантовую яму барьеров, продемонстрирована возможность прецизионного управления положениями уровней размерного квантования в квантовых ямах, не нарушая при этом туннельных и оптических характеристик структуры. Кроме того, в данной работе продемонстрировано, что предложенный метод позволяет существенно изменять положение подзоны в энергетической структуре системы, начиная от состояния, приближённого к дну квантовой ямы, и доходя до уровня, близкого к границе непрерывного спектра [4–7]. Важно отметить, что внедрение тонких потенциальных барьеров в структуру квантовых ям не приводит к нарушению целостности квантовой системы. Анализ распределения волновой функции подтверждает, что система "квантовая яма – барьеры" сохраняет единую когерентность, что играет ключевую роль в процессе резонансного туннелирования. Этот результат имеет важные

практические последствия, так как он позволяет достичь согласования энергетических подзон по всей последовательности квантовых ям. Таким образом, обеспечивается создание эффективных резонансно-туннельных каналов, которые способствуют быстрому и беспрепятственному выносу фотоиндуцированных зарядовых носителей в область непрерывного спектра. Такое согласование энергетических уровней значительно увеличивает эффективность транспортных процессов в наноструктурированных системах, что делает предложенный подход применимым в перспективных фотонных и оптоэлектронных устройствах [5–9].

## **2. Фотовольтаический эффект в полупроводниковых системах**

Устройства, основанные на фотоэлектрическом эффекте - один из способов преобразования солнечной энергии в электрическую [1-3]. Популярными представителями являются концепции, основанные на расширении спектра поглощения и уменьшении термальных потерь за счет использования множественных переходов, промежуточных зон, генерации множественных экситонов. Хотя эти концепции сильно различаются по используемым физическим механизмам, их объединяет то, что они в значительной степени основаны на искусственно созданных материалах с заданными оптоэлектронными свойствами, таких как полупроводниковые квантово-размерные структуры - квантовые ямы [9-15].

Отклонение в поведении носителей от объемного материала необходимо учитывать при описании механизмов работы устройств, что может препятствовать использованию стандартных макроскопических моделей, обычно используемых в объемных фотоэлектрических элементах [8]. Аналогичные проблемы возникают в области светоизлучающих и усиливающих устройств на основе квантово-размерных структур, однако в фотоэлементах режим работы обратный, поскольку в них необходимо обеспечить расширение спектра поглощения и эффективную экстракцию носителей из квантово-размерных структур. В то время как методы расширения спектра поглощения были успешно реализованы [15,20], повышение эффективности экстракции фотоносителей из квантово-размерных структур остается критической проблемой.

В основе фотоэлектрического эффекта в полупроводниках лежит генерация электронно-дырочных пар при поглощении электромагнитного излучения. Для обеспечения разделения зарядов и получения электрического тока обычно используют встроенное электрическое поле р-п перехода [10]. Задача повышения эффективности фотоэлектрических преобразователей (ФЭП) не теряет своей актуальности.

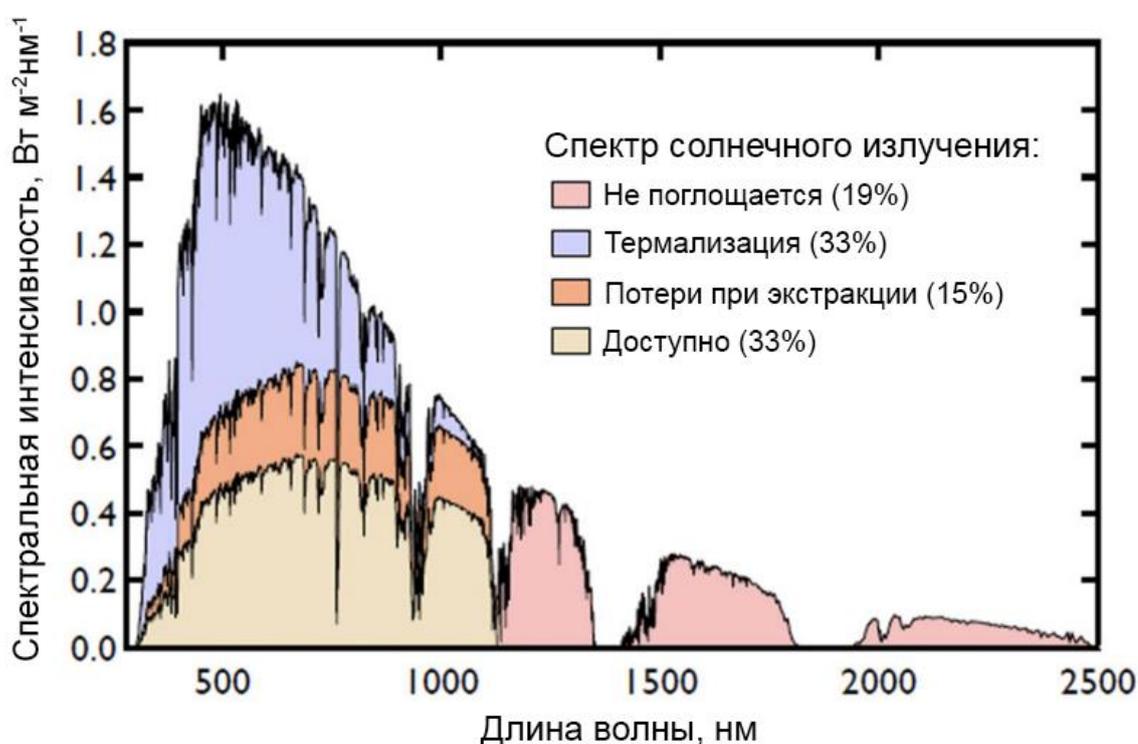
Эффективность фотоэлектрических преобразователей (ФЭП) в значительной степени ограничена шириной запрещённой зоны полупроводниковых материалов, что препятствует их способности охватывать широкий спектр солнечного излучения. Такая ограниченность спектрального аппетита обуславливает фундаментальное ограничение коэффициента полезного действия (КПД) устройств, преобразующих солнечное излучение в электрическую энергию. На протяжении десятилетий этот предел рассматривался как абсолютная граница эффективности для ФЭП с прямым преобразованием энергии солнечного света [11–13, 41]. Согласно теоретическим расчётам, максимально достижимая эффективность преобразования солнечного излучения для полупроводников с одним р-п-переходом не превышает 34%.

В настоящее время лабораторные образцы кремниевых фотоэлементов с одним р-п-переходом достигают КПД порядка 25,5%–26,1%, что близко к теоретическому пределу. Однако дальнейшее повышение эффективности этих устройств существенно затруднено. Уровень улучшения КПД таких систем за последние десять лет составил менее 2%, что подчёркивает ограниченность их возможностей [19]. Основная причина этого заключается в фундаментальных энергетических потерях, связанных с процессом термализации, который неизбежно возникает в однопереходных полупроводниковых системах под воздействием солнечного излучения.

Термализация является следствием фиксированной ширины запрещённой зоны полупроводника, которая определяет диапазон энергий фотонов, способных эффективно поглощаться. Фотоны с энергией, меньшей ширины запрещённой зоны, не поглощаются материалом, что приводит к полной утрате их энергетического вклада. С другой стороны, фотоны с энергией, превышающей ширину запрещённой зоны, теряют избыток энергии в виде тепла, что приводит к снижению общей эффективности преобразования. Как следствие это требует прецизионную настройку края оптического поглощения материалов для оптимизации процессов поглощения в большем спектральном диапазоне. Кроме того, проблемы увеличения КПД таких полупроводниковых систем усугубляются потерями, возникающими на этапах сбора носителей заряда. Этот процесс характеризуется необходимостью нахождения равновесия между эффективным сбором носителей с высоким электрическим потенциалом и скоростью их рекомбинации. Последнее приводит к неизбежному снижению эффективности даже в максимально оптимизированных лабораторных устройствах. Такое сочетание ограничений делает дальнейшее существенное улучшение КПД кремниевых ФЭП с одним р-п-переходом крайне сложным. Таким образом, сочетание спектральных, термализационных и рекомбинационных потерь определяет пределы эффективности традиционных однопереходных фотоэлектрических

преобразователей. Это подчёркивает необходимость дальнейшего поиска альтернативных технологий, включая многопереходные солнечные элементы, использование наноразмерных структур, промежуточных энергетических уровней и других более сложных архитектур солнечных элементов, способных преодолеть данные ограничения.

Одним из способов повышения эффективности ФЭП является уменьшение ширины запрещенной зоны полупроводника [12,17,19]. Однако уменьшение ширины запрещенной зоны приводит к уменьшению величины встроенного электрического поля р-п перехода, тем самым снижая эффективность ФЭП. Это обстоятельство ограничивает возможности использования данного метода [17]. Однако существуют оптимальные значения величин запрещенной зоны для характерных материалов, использование которых позволяет добиться требуемых электрических полей в р-і-п переходе [24].



**Рисунок 1.** Спектральная интенсивность солнечного излучения с учетом факторов понижающих эффективность ограничивающих эффективность классических солнечных элементов

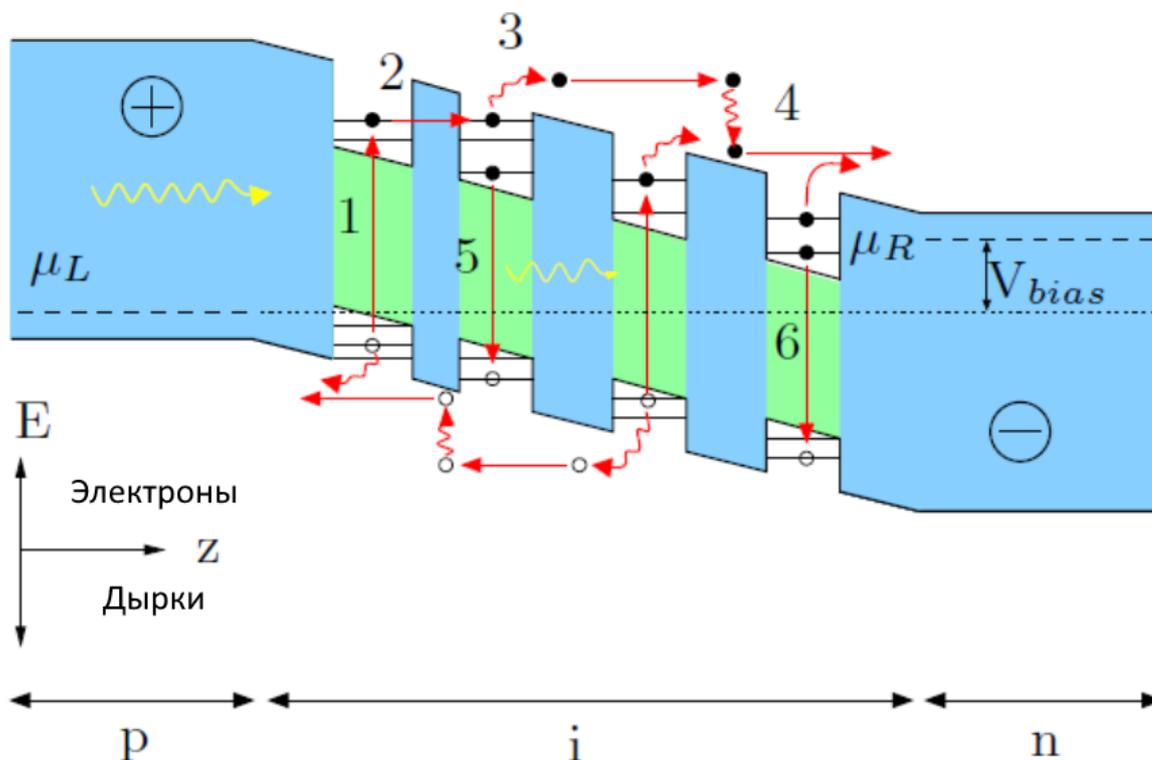
Для частичного преодоления ограничений, связанных с шириной запрещенной зоны материалов в фотоэлектрических преобразователях (ФЭП), применяются многокаскадные структуры. Такой подход основан на использовании нескольких последовательно соединённых фотоэлементов, каждый из которых изготавливается из материалов с различной шириной запрещенной зоны. Эти материалы подбираются таким

образом, чтобы каждый каскад фотоэлемента эффективно поглощал своё собственное, определённое шириной запрещённой зоны, энергетическое окно солнечного спектра [18, 20–24].

Многокаскадные ФЭП работают на принципе разделения спектральных диапазонов: нижние энергии фотонов улавливаются материалами с меньшей шириной запрещённой зоны, тогда как более высокоэнергетичные фотоны поглощаются верхними каскадами с большей шириной запрещённой зоны. Такой подход позволяет оптимально использовать широкий диапазон энергии солнечного излучения. Генерируемый каждым каскадом электрический ток объединяется, что в итоге приводит к увеличению общей плотности тока, генерируемого устройством, и, как следствие, к повышению его суммарного коэффициента полезного действия. Это становится возможным за счёт снижения энергетических потерь, которые характерны для однослойных (однокаскадных) фотоэлементов, где фотоны с энергией, превышающей ширину запрещённой зоны, теряются в виде тепла. Кроме того, одним из перспективных направлений, позволяющих повысить эффективность преобразования солнечной энергии, является использование явления множественной экситонной генерации (МЭГ). В этом процессе один фотон видимого спектра может производить не один, а два или более электронов, что значительно увеличивает эффективность преобразования энергии. Такие результаты достигаются благодаря тому, что избыточная энергия поглощённого фотона, вместо перехода в тепловую, тратится на возбуждение дополнительных экситонов. Это повышает квантовый выход фотоэлемента, позволяя генерировать более двух электронов на каждый поглощённый квант солнечного излучения, что особенно важно для материалов с узкой запрещённой зоной, где потери тепла обычно существенно ограничивают эффективность [18, 20–24]. Таким образом, использование многокаскадных подходов и процессов типа МЭГ открывает перспективы для значительного увеличения коэффициента полезного действия ФЭП. Это становится важным шагом в разработке технологий нового поколения, направленных на улавливание большего количества энергии из солнечного излучения.

Альтернативным способом повышения эффективности ФЭП является введение квантово-размерных структур в  $i$ -область  $p$ - $i$ - $n$  перехода [4,6,8,15-24]. Этот способ позволяет расширить спектр поглощения за счет дополнительных переходов между уровнями размерного квантования электронов и дырок. При этом не происходит снижение величины электрического поля  $p$ - $i$ - $n$  перехода. В таком случае расширение спектра поглощения достигается за счет уменьшения эффективной ширины запрещенной зоны в квантово-размерных структурах. Возможность настройки границы поглощения позволяет

оптимизировать согласование с солнечным спектром как в одно-, так и в многопереходных конфигурациях подобных структур.



**Рисунок 2** Диаграмма p-i-n перехода с квантовыми ямами в i-области: 1 - Фотогенерация пар электрон-дырка; 2 - Резонансное и нерезонансное туннелирование; 3 - Тепловой выход и вынос встроенным полем; 4 - Релаксация неупругим рассеянием (оптические фононы); 5 - Излучательная рекомбинация; 6 - Безызлучательная рекомбинация.

Одной из основных проблем концепции является эффективный вывод носителей при большом напряжении смещения и соответствующих условиях слабого поля, когда выход носителей из глубоких квантовых ям становится критическим. В качестве основного метода, повышения эффективности фотоэлементов, рассмотрим работы [42-48], в которых проведено исследование транспорта и экстракции фотоносителей в сверхрешетках с квантовыми ямами II типа (GaAsSb/GaAsN). В конструкциях поглотителей на основе сверхрешеток с квантовыми ямами последние обеспечивают не только регулируемое поглощение для генерации носителей заряда, но и расширенные состояния для обеспечения вывода носителей заряда, что является ключевой проблемой в подобных структурах. Дополнительный фототок достигается за счет уменьшения темпов рекомбинации в областях устройства с уменьшенной шириной запрещенной зоны. Транспорт по сверхрешетке с квантовыми ямами происходит по минизоне, который сопровождается тепловым выбросом из крайних квантовых ям в непрерывный спектр.

Увеличение наведённого электрического поля существенным образом влияет на степень локализации волновых функций носителей в квантовых ямах. При таком сценарии происходит постепенный переход от транспорта по минизоне, к перескокам по состояниям Ванье-Штарка, и в крайнем случае к последовательному туннелированию по локализованным состояниям в квантовых ямах по сверхрешетке. Данный аспект был подтверждён в работе [48], где при увеличении периода сверхрешетки с квантовыми ямами от 3 до 12 нм, происходит переход от квази-баллистического типа транспорта по минизоне к последовательному туннелированию, сопровождающимся термическим выбросом за счет процессов рассеяния на оптических фононах.

Существенного увеличения спектральной чувствительности в фотоэлектрических преобразователях (ФЭП) можно добиться путем введения глубоких квантовых ям в  $i$ -область  $p$ - $i$ - $n$  перехода. Однако с использованием глубоких квантовых ям возникает ряд сложностей, связанных с эффективным извлечением носителей заряда из состояния локализации в квантовых ямах в область непрерывного спектра. Данная проблема была отмечена в предыдущих исследованиях, например, в [4, 5], где указывалось, что генерация и последующая рекомбинация носителей в квантовых ямах может существенно снижать эффективность работы устройства. Это обусловлено тем, что в отсутствие эффективного механизма транспорта фотоэлектронов и фотодырок к состояниям непрерывного спектра возможно значительное уменьшение вклада носителей в фототок за счёт их рекомбинации внутри ям. Эффективное извлечение фотоносителей из квантовых ям необходимо для предотвращения возможных потерь, связанных с тем, что глубокие квантовые ямы не только служат для поглощения фотонов, но также могут действовать как ловушки для зарядов, первоначально находящихся в основном спектре. Захваченные в квантовые ямы носители с высокой вероятностью рекомбинируют до того, как покинут зону локализации, что напрямую уменьшает общую эффективность преобразования солнечной энергии. Также отметим, что эффективность теплового выброса носителей в область непрерывного спектра значительно ухудшается по мере увеличения глубины квантовых ям, что еще более осложняет задачу их оптимальной эксплуатации.

В работе [4] предложено управлять нижним энергетическим уровнем размерного квантования в квантовой яме через создание цепочки туннельно-прозрачных барьеров. Такой метод открывает возможность регулировки степени локализации носителей, их энергий и, соответственно, вероятностей перехода в непрерывный спектр. Последующее исследование [5] демонстрирует, что численные расчёты и экспериментальные данные фотолюминесценции подтверждают изменение положения основного энергетического уровня на 100 мэВ. Данный результат доказывает потенциал указанного метода для

эффективного управления энергетическим спектром нижнего уровня размерного квантования вплоть до достижения его совпадения с областью непрерывного спектра. Это позволяет практически полностью устранить ограничения, связанные с рекомбинацией в квантовых ямах. Особенностью предложенного подхода является его технологическая простота, а также высокая универсальность, что делает его перспективным для широкого круга приложений. Например, данный метод может быть использован для выравнивания энергетических подзон в последовательности квантовых ям в сложных электрических полях, характерных для конфигураций  $p-i-n$  элементов. Кроме того, в дальнейших работах группы [4] исследованы резонансно-туннельные структуры, позволяющие согласовывать энергетические уровни размерного квантования в квантовых ямах с электрическими полями  $p-i-n$  перехода, что значительно повышает эффективность извлечения носителей заряда. Такой подход открывает новые возможности для разработки высокоэффективных фотоэлектрических элементов и может быть применён в различных областях фотоники и энергетики.

В отличие от концепции, предложенной в работах [42-49], данное решение позволяет задействовать большую часть спектра, за счет включения процессов поглощения на глуболежащих уровнях в квантовых ямах. Помимо этого, использование данного метода не приводит к нарушению туннельных характеристик квантовых ям, распределение волновой функции остается единой и равномерным по всему объёму квантовой ямы. Исследуемый метод позволяет осуществлять прецизионную настройку спектра квантовой ямы для обеспечения согласования подзон в последовательности квантовых ям. Как следствие данный метод позволяет реализовать режим резонансного туннелирования в структуре с квантовыми ямами, для обеспечения выноса носителей из глубоких квантовых ям.

### **3. Экситоны в квантовых ямах**

Особая роль экситонов в оптических переходах стала понятной с момента их открытия в объемном полупроводнике в 1952 г [51]. Одной из важных характеристик экситона является энергия связи, обусловленная кулоновским взаимодействием электрона и дырки [8]. Во многих объемных полупроводниках эта энергия относительно мала, обычно ниже энергии фонона при комнатной температуре. Однако в широкозонных полупроводниках, таких как GaN и ZnO, она намного больше, так что экситонные эффекты преобладают в оптических переходах даже при комнатной температуре.

Экситонный спектр в квантово-размерных структурах претерпевает существенные изменения по сравнению с объемными материалами вследствие квантового ограничения

движения носителей в одном из направлений [58]. При межзонном оптическом поглощении, связанном с переходами из валентной зоны в зону проводимости электрона, в яме образуется квазидвумерный экситон. В предельном случае, когда  $L_z \ll a_{ex}$ , энергия связи основного состояния ( $n = 1$ ) увеличивается до максимального значения  $4E_{ex}^{3D}$ , в четыре раза больше объёмного экситона [8].

$$E_{ex}^{2D} = \frac{E_{ex}^{3D}}{(n - 1/2)^2}$$

Размерное квантование электронов и дырок в таких структурах приводит к увеличению энергии связи экситонов и времени жизни [58]. В результате экситоны, например, в квантовых ямах, могут проявляться даже при комнатных температурах и поэтому играют решающую роль в различных оптоэлектронных приложениях.

Экситонные состояния в квантовых ямах экспериментально и теоретически изучаются уже несколько десятилетий. Теоретические исследования [73] в целом опережали экспериментальные из-за развитой квантовой теории и явного отставания технологического проектирования от практической реализации экспериментальных методик [58] выращивания высококачественных гетероструктур. Точное экспериментальное определение энергии связи экситона обычно затруднено неоднородностью ансамбля экситонов в гетероструктурах из-за дефектов и шероховатостей интерфейсов. Дефекты и шероховатости интерфейсов гетероструктур, особенно для узких квантовых ям, ухудшают точность измерения оптических переходов между экситонными состояниями. Высококачественные гетероструктуры стали доступны лишь недавно и дают хорошие возможности для экспериментальных исследований экситонных эффектов в полупроводниковых структурах [69]. Поэтому точные теоретические результаты по экситонным состояниям могут существенно продвинуть текущие эксперименты по гетероструктурам.

В данной работе фундаментальный интерес представляют исследования энергии связи экситона в структурах с квантовыми ямами со встроенной серией тонких туннельно-прозрачных барьеров. Возможность эффективного и точного расчета энергий связи экситонов в квантовых структурах является важной задачей, и поэтому ей уделяется большое внимание. Однако эта проблема довольно сложна, и, хотя достигнут значительный прогресс, новые системы материалов и новые типы приложений требуют более гибких, точных и эффективных методов решения.

Теоретическое описание экситона в объёмном полупроводнике обычно проводится в рамках приближения Ванье-Мотта [8,54,55] при помощи огибающей функции, что в простейшем случае приводит к водородоподобной модели [73]. В этой модели движение

экситона как целое и относительное движение электрона и дырки разделены. Это приводит к двум независимым уравнениям Шрёдингера для центра масс и относительного движения. Определение экситонного спектра и энергия связи экситонов в квантовых ямах обычно получается из решения двухчастичного уравнения Шрёдингера, которое, в свою очередь, осложняется невозможностью выделить движение центра масс. Кроме того, вырожденная валентная зона в простейшем случае требует рассмотрения диагональных членов гамильтониана Латтинджера для дырки [79]. Эти осложнения приводят к трехмерной системе, которая может быть решена при помощи вариационного подхода [73,70], путем решения самосогласованного уравнения Шредингера и Пуассона [67], в отдельных случаях методом возмущений [73], или путем прямого численного решения [59,73,76].

Основные трудности связаны с тем, что переменные в Гамильтониане, описывающем относительное движение электронно-дырочной пары, не могут быть разделены: наличие потенциала квантовой ямы нарушает трансляционную инвариантность системы, делая невозможным выделение плоскостного движения электронно-дырочной пары, электронов и дырок от движения в ограничивающем направлении. В отдельных случаях, при исследовании квазидвумерного электронного газа, пренебрегают шириной квантовой ямы и получают решения экситонов для ультратонких квантовых ям [72]. Однако при таком рассмотрении задачи, совершенно не учитываются особенности кулоновского взаимодействия носителей по направлению квантования.

В настоящее время преобладающая часть расчетов проводится в рамках вариационного подхода [59-61,70-73], когда постулируется определенный вид волновой функции экситона, зависящий от одного или нескольких вариационных параметров. Затем вычисляется энергия экситона путем минимизации соответствующего функционала энергии по вариационным параметрам. Стандартный вариационный подход основан на выборе определенного вида пробной функции, которая обычно выбирается в виде произведения трех слагаемых. Первые две представляют собой одночастичные одномерные волновые функции электрона и дырки для ограниченного движения в плоскости квантовой ямы. Третий член описывает относительное движение электрона и дырки за счет кулоновского взаимодействия. Точность результатов зависит от сложности третьего члена пробной функции и количества вариационных параметров. Существует достаточно литературы [70-73], посвященной точным вариационным численным расчетам энергии связи экситона в квантовых ямах. Наиболее продвинутые расчеты включают эффекты кулоновского экранирования из-за несоответствия диэлектрических

проницаемостей, а также несоответствия эффективных масс на гетеропереходах и учет вырождения зон [77,78].

Другой обсуждаемый в литературе подход [73] основан на разложении волновой функции электронно-дырочной огибающей по полной системе собственных функций одночастичного Гамильтониана, описывающего движение электронов (дырок) в соответствующих ограничивающих потенциалах квантовой ямы. Коэффициенты этого разложения представляют собой волновые функции движения в плоскости. Они удовлетворяют бесконечному набору дифференциальных уравнений, связанных из-за смешивания различных электронных и дырочных подзон, вызванных кулоновским взаимодействием. Такая система может быть решена только численно после соответствующего усечения базиса. Другой способ — решить систему в диагональном приближении и рассмотреть недиагональные элементы с помощью теории возмущений [70]. Повышение точности в этом подходе сталкивается с трудностями, связанными с неизвестными ошибками из-за усечения базиса.

Альтернативный метод, предложенный в [63], основывается на адаптации самосогласованного подхода Хартри к исследованию экситонов в квантовых ямах. Главная идея этого подхода заключается в том, чтобы отказаться от заранее задаваемой функциональной зависимости для волновой функции огибающей, предоставляя возможность более гибкого описания её формы. Вместо использования простых аналитических выражений, общая волновая функция представляется в виде комбинации нескольких неизвестных функций, каждая из которых зависит от меньшего числа переменных по сравнению с общим числом параметров задачи. Этот подход позволяет существенно расширить пространство возможных решений.

Применяя вариационный принцип к такой функции, удаётся сформулировать систему уравнений, описывающих одновременно движение заряженных частиц (электронов и дырок) вдоль оси удержания в квантовой яме и относительное движение экситона в двумерной плоскости. Важной особенностью данного метода является включение в уравнения эффективных потенциалов, которые определяются самосогласованно вместе с волновыми функциями. Это делает модель более универсальной и адаптивной по сравнению с традиционными подходами. Тем не менее, несмотря на достигнутые успехи, существующие методики сохраняют определённые ограничения, обусловленные их фундаментальной природой. К примеру, стандартные вариационные подходы требуют использовать функции строго определённого вида, что сужает пространство возможных решений. Попытка преодолеть эту трудность за счёт увеличения числа вариационных параметров наталкивается на проблему высокой

вычислительной сложности, особенно при введении трёх и более параметров в оптимизационные задачи. Таким образом, расширение функционального пространства за счёт дополнительных параметров не всегда оправдано, что подчеркивает необходимость дальнейшего развития математических и численных методов решения подобного рода задач.

Широкие квантовые ямы (~25 нм) с интегрированными туннельно-прозрачными барьерами представляют собой сложные системы, где традиционные аналитические методы расчёта энергии экситонов, такие как приближение Френкеля для прямоугольных ям [8,51] или Ванье-Мотта [54–55], оказываются неприменимыми из-за существенной модификации потенциала барьерами. Эти методы, предполагающие однородный или слабomodулированный потенциал, не учитывают локальные возмущения, вносимые тонкими барьерами (толщиной 2–3 нм), которые формируют дополнительные интерфейсы и гибридизируют экситонные состояния. В частности, стандартные подходы игнорируют нелинейные эффекты туннелирования и межподзонного взаимодействия, что приводит к завышенным оценкам энергии связи на 15–20% [73], как показано в сравнительных расчётах для структур GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Для преодоления этих ограничений в работе применён метод прямого численного решения трехмерного уравнения Шрёдингера для экситона с использованием конечно-разностной дискретизации второго порядка [75], обеспечивающей асимптотическую точность даже для систем со сложным профилем потенциала. Уравнение дискретизируется на равномерной пространственной сетке с шагом  $\Delta z = 0.05$  нм, что соответствует 500 узлам для ямы шириной 25 нм. Граничные условия Дирихле ( $\psi = 0$  на краях расчётной области) гарантируют локализацию волновой функции в области квантовой ямы.

#### **4. Постановка целей и задач исследования**

Проведённый анализ современных исследований в области квантово-размерных гетероструктур позволил сформулировать ключевые задачи диссертационной работы, направленные на преодоление существующих ограничений в управлении энергетическим спектром и транспортом носителей.

Первоочередной задачей является исследование влияния конфигурации встроенных туннельно-прозрачных барьеров на энергетические характеристики квантовых ям. Для этого предполагается провести систематическое варьирование геометрических параметров барьеров (толщина, высота, количество) с последующим расчётом положений уровней размерного квантования и распределения волновых функций методом конечно-разностной дискретизации уравнений Шрёдингера в

приближении эффективной массы. Особое внимание уделяется разработке адаптивного алгоритма, позволяющего с высокой точностью (погрешность  $\leq 1$  мэВ) настраивать основной энергетический уровень в диапазоне от дна потенциальной ямы до границы непрерывного спектра.

Второй задачей выступает построение модели резонансного туннелирования в многослойных структурах, интегрированных в  $i$ -область  $p$ - $i$ - $n$  перехода. На основе данных, полученных при решении первой задачи, будут определены оптимальные конфигурации барьеров, обеспечивающие согласование энергетических подзон вдоль всей последовательности квантовых ям. Для этого предложено использовать исследуемый метод и на его основе формировать последовательность квантовых ям с резонансным согласованием подзон по всей последовательности квантовых ям помещённых в  $p$ - $i$ - $n$  переход.

Третья задача посвящена исследованию влияния встроенных барьеров на энергию связи экситонов, что имеет как фундаментальное, так и прикладное значение. Введение барьеров модифицирует пространственное распределение волновых функций электронов и дырок, изменяя степень их локализации и, как следствие, кулоновское взаимодействие. Для количественного анализа предложено решение двумерного уравнения Шрёдингера с учётом экранирования и непараболичности зонной структуры, что позволит определить зависимость энергии связи от геометрии барьеров. Полученные данные критически важны для интерпретации спектров фотолюминесценции, поскольку сдвиги и расщепление пиков излучения непосредственно связаны с модификацией экситонных состояний. Практическая значимость этой части работы заключается в возможности управления спектральным откликом структур для задач фотоники, например, создания перестраиваемых однофотонных источников или высокочувствительных фотодетекторов.

# ГЛАВА 1. МЕТОД УПРАВЛЕНИЯ ПОЛОЖЕНИЕМ ПОДЗОН В КВАНТОВЫХ ЯМАХ

## 1.1 Введение

Интеграция квантовых ям (КЯ) в  $i$ -область  $p$ - $i$ - $n$  солнечных элементов рассматривается как перспективная стратегия повышения их эффективности за счёт расширения спектра поглощения в длинноволновую область, недоступную для объёмных материалов [1–12]. Квантовое ограничение, возникающее в таких структурах, приводит к образованию дискретных энергетических уровней в запрещённой зоне, что позволяет поглощать фотоны с энергией ниже ширины запрещённой зоны основного материала. Например, в структурах на основе GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As введение КЯ шириной 10–15 нм смещает порог поглощения с 870 нм (для объёмного GaAs) до 950–1000 нм, увеличивая фототок на 15–20% [7,9]. Однако ключевым ограничением данной технологии остаётся низкая эффективность извлечения фотогенерированных носителей заряда из глубоких квантовых ям, где основной энергетический уровень (например,  $E_1 \approx 50$ –80 мэВ для GaAs-ямы шириной 10 нм) может находиться на 150–200 мэВ ниже дна зоны проводимости непрерывного спектра. Такая энергетическая диспропорция создаёт потенциальные барьеры, препятствующие термоэмиссии и диффузии носителей, особенно при комнатной температуре, где тепловая энергия (~26 мэВ) недостаточна для преодоления этих барьеров. В результате значительная часть носителей остаётся локализованной в яме, где доминируют конкурирующие процессы радиационной и безызлучательной рекомбинации, что снижает общий фототок и эффективность структур. Экспериментальные исследования [4,11] демонстрируют, что в структурах с глубокими КЯ до 40% фотогенерированных электрон-дырочных пар рекомбинируют до экстракции, что ограничивает прирост эффективности на уровне 5–8% вместо теоретически предсказанных 15–20%.

Для преодоления этих ограничений необходимо обеспечить извлечение носителей в темпах, превышающих характерные времена рекомбинации. Одним из эффективных решений является использование туннелирования, происходящего благодаря резонансному согласованию нижних энергетических подзон в последовательности квантовых ям [4]. Ключевым принципом данной концепции является построение структуры, где электрическое поле  $p$ - $i$ - $n$  перехода способствует туннелированию фотовозбужденных электронов и дырок через последовательно расположенные квантовые ямы. В этой системе резонансное согласование нижних подзон энергетических уровней между соседними ямами позволяет облегчить процесс туннелирования. Заключительная фаза извлечения носителей включает в себя термический выброс носителей из крайней

квантовой ямы в непрерывный спектр. Для успешной реализации такой схемы важнейшим условием остаётся оптимизация ширины барьеров между квантовыми ямами. Это должно обеспечить значительно меньшее время туннелирования по сравнению со временем рекомбинации носителей в ямах, что, в свою очередь, повысит эффективность вывода носителей в непрерывный диапазон [6]. Таким образом, предложенный подход позволяет существенно повысить эффективность извлечения фотоносителей из глубокой квантовой ямы в солнечных элементах на основе  $p-i-n$  структур.

Целью данного исследования является создание модельной структуры с последовательностью квантовых ям, в которой реализуется режим резонансного туннелирования фотогенерированных носителей. Ключевой задачей становится преодоление энергетических несоответствий, вызванных падением напряжения между соседними ямами под действием электрического поля в  $i$ -области  $p-i-n$ -перехода. Для достижения резонансного согласования подзон требуется точная регулировка положения основного уровня размерного квантования в каждой яме, обеспечивающая выполнение условия согласования подзон по всей последовательности квантовых ям. Необходимо иметь возможность управлять положением основной подзоны в широком диапазоне энергии, от дна квантовой ямы вплоть до уровня непрерывного спектра.

Контроль над уровнями дискретного квантования в квантовых ямах может быть достигнут за счёт изменения их геометрических параметров, таких как ширина и глубина ям. Однако как было отмечено в предыдущих исследованиях [4,5], уменьшение ширины квантовой ямы до необходимых значений может столкнуться с серьёзными ограничениями, связанными с технологическими возможностями, так как требуется формирование ям чрезвычайно малой ширины, близкой к текущим технологическим пределам. Другим подходом для регулирования энергетических уровней является изменение состава материала, используемого для создания квантовых ям, что позволяет контролировать ширину запрещённой зоны. Этот метод предполагает возможность систематического увеличения межзонного энергетического расстояния путём модификации состава материала квантовых ям, например, за счёт вариации доли легирующих компонентов. Однако данный подход также сопряжён с технологическими трудностями, включая необходимость прецизионного контроля состава и стехиометрии материала на наномасштабном уровне, а также возможное снижение качества гетероструктуры из-за образования дефектов при значительных изменениях состава материала. Таким образом, несмотря на перспективность модификации геометрических параметров или состава материала квантовых ям, их реализация требует преодоления существенных инженерных трудностей. Разработка более технологически реализуемых

решений представляется важным этапом для дальнейшего внедрения структур с резонансным туннелированием в солнечные элементы и другие оптоэлектронные устройства.

В работе [4] была предложена концепция управления уровнями размерного квантования в пределах квантовой ямы посредством введения в её объём серии тонких туннельно-прозрачных барьеров. Экспериментально и теоретически было подтверждено, что добавление таких барьеров приводит к значительному сдвигу энергетического уровня нижней подзоны вплоть до  $\sim 100$  мэВ [5]. Данный переход детально изучался с использованием низкотемпературной фотолюминесценции, и результаты показали высокую степень совпадения теории с экспериментальными данными, что подчёркивает стабильность предложенного метода. Дополнительным преимуществом данного подхода является возможность точной настройки энергетического спектра квантовой ямы в широком диапазоне: начиная от глубоких уровней у дна квантовой ямы до значений, приближающихся к краю её непрерывного спектра. Введение серии равномерно распределённых туннельно-прозрачных барьеров ни в теоретической, ни в экспериментальной модели не вызывает разрушения целостности квантовой системы «яма-барьеры». Сохранение единой волновой функции, непрерывно распределённой по всей структуре квантовой ямы, свидетельствует о качественном согласовании энергетических параметров при добавлении барьеров. Кроме того, экспериментальные данные демонстрируют, что при равномерном введении барьеров туннельные и оптические свойства исследуемой структуры остаются практически неизменными. Такой подход позволяет не только регулировать энергетические подзоны, но и сохранять прозрачность системы для туннелирования, что является ключевым требованием для создания эффективных наноструктур, включая те, которые используются в квантовой электронике и оптоэлектронных устройствах.

Представленный метод управления энергетическим спектром квантовых ям посредством введения туннельно-прозрачных барьеров, несмотря на первоначальную апробацию на двух модельных структурах, требует углублённого анализа для верификации его универсальности и выявления границ применимости. В рамках данной работы проведено детальное исследование, направленное на систематизацию влияния барьеров на положение подзон и транспортные характеристики структуры. Выполнены численные расчёты положения подзон для широкого диапазона конфигураций, включая вариации количества барьеров (от 1 до 8), их толщины (2–3 нм) в квантовых ямах на основе  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . Решение уравнения Шрёдингера в приближении эффективной

массы с учётом параболической дисперсии проводилось методом конечных разностей второго порядка, что обеспечило точность определения энергетических уровней  $\pm 0.5$  мэВ.

Усовершенствование метода, предложенного в работе [4], заключалось во введении адаптивного алгоритма оптимизации барьерных параметров, учитывающего не только резонансные условия для электронов, но и подавление кулоновского экранирования за счёт синхронизации потоков электронов и дырок. Полученные результаты демонстрируют, что управление спектром через барьерную инженерию открывает новые возможности для проектирования нанофотонных устройств, таких как одноэлектронные транзисторы с управляемой прозрачностью канала или фотоумножители с квантово-размерными активными слоями. Перспективы применения метода включают создание гибридных структур, сочетающих квантовые ямы с топологическими изоляторами, где резонансное туннелирование может быть использовано для управления спиновыми токами, что актуально для развития спинтроники и квантовых вычислений. Практическая значимость работы заключается в возможности применения таких структур в высокоэффективных фотоэлектрических элементах, где расширение спектра поглощения в инфракрасную область (до 1100 нм для GaAs-систем) сочетается с эффективной экстракцией носителей.

## 1.2 Описание модели

В качестве исследуемой системы выступает гетероструктура с квантовыми ямами на основе GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Гетероструктуры на основе GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As широко исследованы в современной физике полупроводников. На основе модельной структуры продемонстрирован принцип резонансно-туннельной последовательности квантовых ям, в которых управление уровнями размерного квантования осуществляется исследуемым методом.

Для расчета энергий электронных подзон в квантовой яме в параболическом приближении решается уравнение Шрёдингера в приближении огибающей [77]:

$$\left\{ -\frac{\partial}{\partial z} \frac{\hbar^2}{2m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) \right\} \psi(z) = E\psi(z), \quad (1.1)$$

где  $m(z)$  - эффективная масса электрона,  $U(z)$  - профиль потенциала квантовой ямы электрона.

Для расчета энергий электронных подзон в квантовой яме воспользовались теорией сшивки:

$$\begin{aligned} \psi_{well}(z)|_{z=a-0} &= \psi_{barrier}(z)|_{z=a+0} \\ \frac{1}{m_{well}^*} \frac{d\psi_{well}(z)}{dz} \Big|_{z=a-0} &= \frac{1}{m_{barrier}^*} \frac{d\psi_{barrier}(z)}{dz} \Big|_{z=a+0} \end{aligned} \quad (1.2)$$

где  $\psi_{well}(z)$  - волновая функция электрона в яме,  $\psi_{barrier}(z)$  - волновая функция электрона в барьере,  $a$  – положение границы раздела ямы – барьера,  $m_{well}^*$  - эффективная масса электрона в яме,  $m_{barrier}^*$  - эффективная масса электрона в барьере. При сшивании решений для волновых функции, полученных в разных областях пространства необходима непрерывность и гладкость волновой функции на конечном размере пространства. При введении в квантовую яму серии барьеров, количество гетерограниц возрастает, что отражается на размерности полученной СЛАУ. Далее, применяя численный метод расчета [37] (Приложение 1.1), либо методом конечно-гладкой аппроксимации (Приложение 1.2) определяем положение уровней размерного квантования в квантовой яме.

Для расчета дырочных подзон воспользуемся Гамильтонианом Латтинджера, который представляет собой теоретическую основу, используемую для описания зонной структуры полупроводников в параболическом приближении валентной зоны, таких как GaAs [89]. Вывод закона дисперсии для валентной зоны приведен в [8], результат которого следующий:

$$E_{hh} = Ak^2 - \sqrt{B^2k^4 + (D^2 - 3B^2)(k_x^2k_y^2 + k_z^2k_y^2 + k_x^2k_z^2)} \quad (1.3)$$

$$E_{lh} = Ak^2 + \sqrt{B^2k^4 + (D^2 - 3B^2)(k_x^2k_y^2 + k_z^2k_y^2 + k_x^2k_z^2)} \quad (1.4)$$

Перепишем выражение в виде параболической дисперсии

$$E_{hh} = -\frac{\hbar^2k^2}{2m_{hh}}, \quad E_{lh} = -\frac{\hbar^2k^2}{2m_{lh}}, \quad (1.5)$$

Гамильтониан Латтинджера для кубического полупроводника на основе цинковой обманки, такого как GaAs, записывается в терминах Блоховских волновых функций и эффективных масс электронов и дырок. Эффективные массы выражаются через параметры Латтинджера ( $\gamma_1 = 6.85$ ,  $\gamma_2 = 2.1$ ,  $\gamma_3 = 2.9$ ) [90].

Для расчета уровней размерного квантования в квантовой яме для электронов и дырок воспользуемся параметрами материала GaAs и  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , которые приведены в таблице 1.1 [78].

**Таблица 1.1** Расчетные параметрами материала GaAs и  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 

Материал	$E_g$ , eV	$U_c/U_h$ , meV	Epsilon	$m_e^*, \cdot m_0$	$m_{hh}^*, \cdot m_0$	$m_{lh}^*, \cdot m_0$
GaAs	1,424	-	12,9	0,067	0,365	0,085
$\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$	1,802	237/127	12,05	0,093	0,45	0,105

Важно подчеркнуть, что данная работа сосредоточена на реализации метода конструирования резонансно-туннельной структуры, в которой реализован эффективный вынос носителей из глубоких квантовых ям. Исследуемый метод управления положениями подзон в квантовых ямах выступает средством достижения основной цели работы, а именно обеспечения эффективного выноса носителей в непрерывный спектр. Следует отметить, что его реализация может быть успешно осуществлена на разнообразных структурах полупроводниковых материалов. В настоящем исследовании для анализа данного метода используется гетероструктура с квантовыми ямами, основанная на системе GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . Выбор данной структуры обусловлен ее высокой распространённостью, а также наличием обширной исследовательской базы, посвящённой как этому материалу, так и структуре в целом.

### 1.3 Обсуждение результатов

В данном разделе представлены результаты анализа исследуемого метода, касающегося проектирования и оптимизации структуры последовательности квантовых ям. Осуществлен расчет данной структуры, в ходе которого было изменено положение подзон с заданным шагом, применяя исследуемый метод. На основании полученной расчетной модели реализован режим резонансного согласования нижних подзон в данной последовательности квантовых ям в условиях заданного электрического поля p-i-n перехода. Также в рамках исследования было проанализировано влияние размытия гетерограниц барьеров, находящихся в квантовой яме, на уровни размерного квантования. Для этого была рассмотрена ситуация полного размытия барьеров в объеме квантовой ямы, что позволяет более подробно оценить физические процессы, происходящие при этом. Результаты были сопоставлены с условиями, когда размытие гетерограниц барьеров отсутствует. Это исследование дает возможность понять, каким образом размытие гетерограниц влияет на положение уровней размерного квантования и степень локализации волновых функций. Полученные выводы могут послужить основой для дальнейших экспериментальных и теоретических исследований, направленных на оптимизацию параметров структур с квантовыми ямами.

На основе исследуемого метода разработан алгоритм для подбора конфигурации барьеров в квантовой яме, направленный на достижение заданного положения подзон. В рамках данного исследования было тщательно проанализировано влияние различных конфигураций барьеров, вводимых в квантовую яму, на уровни размерного квантования, их спектр, а также степень локализации волновых функций, относящихся к электронной подсистеме. Кроме того, продемонстрировано, что систему квантовая яма – барьеры необходимо рассматривать как целое, ввиду распределения единой волновой функции по объёму квантовой ямы. Помимо этого, равномерное распределение барьеров по объёму квантовой ямы не приводит к существенным изменениям туннельного и оптического матричных элементов. Волновая функция в такой системе остается подобной пустой квантовой яме, имея небольшие модуляции в области барьеров, что не сильно сказывается на туннельных и оптических характеристиках структуры.

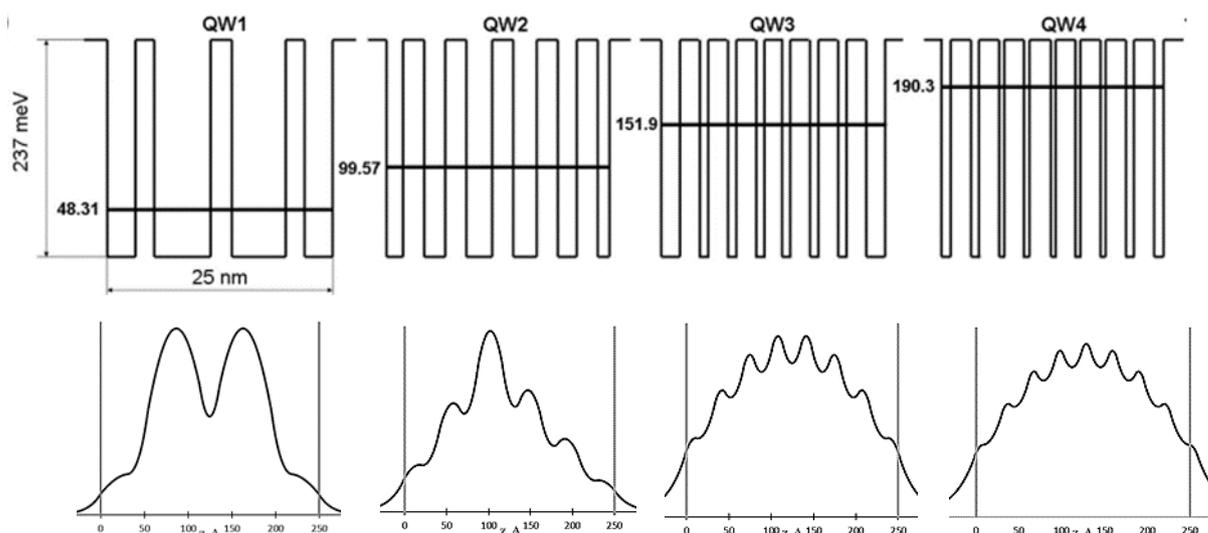
### 1.3.1 Управление положением подзон в КЯ

Для исследования метода рассмотрены ситуации с различной конфигурацией введенных барьеров в квантовые ямы. Расчеты электронных подзон проводились для квантовых ям GaAs/Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>As. Исследование проводили электронной подсистемы, где глубина квантовых ям составляла 237 мэВ, ширина ям 25 нм. По результатам расчётов, было показано, что положение нижней подзоны можно регулировать почти от дна квантовой ямы до уровня непрерывного спектра.

В качестве иллюстрации возможностей метода рассмотрим пример структуры из квантовых ям приведенный на рисунке 1.1а. Наборы барьеров выбирались таким образом, чтобы обеспечить сдвиг нижней подзоны от ямы к яме на фиксированную величину (50 мэВ). Как видно из таблицы 1.2, добиться желаемого положения уровня можно с достаточно высокой точностью (несколько мэВ), которая значительно меньше теплового уширения ( $k_B T$ ) уровней при комнатной температуре. Точность достигаемого положения уровня в первую очередь определяется тем, что точность установки ширины барьера ограничена шириной одиночного монослоя (0,283 нм). Тем самым, подбирая соответствующим образом конфигурацию вводимых в квантовую яму барьеров возможно обеспечить требуемое положение подзон в квантовых ямах. Данный метод относится к инженерии состояний в квантово-размерных системах, вследствие того, что положением подзоны можно управлять с высокой точностью, значительно ниже комнатной температуры  $k_B T$ .

**Таблица 1.2** Расчетные энергии низших подзон электронов для квантовых ям, представленных на рис. 1а.

№ КЯ	Количество барьеров	$E_1$ , мэВ	Заданные значения $E$ , мэВ
0	-	6.81	-
1	3	48.31	50
2	5	99.57	100
3	7	151.9	150
4	8	186.4	200



**Рисунок 1.1** Потенциальный профиль структур с квантовыми ямами GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As с различной конфигурацией вставленных барьеров (а) и распределение волновой функции нижней энергетической подзоны (б).

Исследование распределения волновой функции основного состояния в квантовых ямах с интегрированными барьерами, представленное на рис. 1.1(б), демонстрирует ключевую особенность таких систем — сохранение целостности волновой функции даже при наличии множества барьеров. На графике видно, что в широкой квантовой яме, содержащей ряд туннельно-прозрачных барьеров, волновая функция нижнего энергетического уровня не фрагментируется на отдельные компоненты, соответствующие изолированным мини-ямам, а сохраняет глобальную когерентность, характерную для единой потенциальной ямы. Это указывает на то, что введенные барьеры не приводят к разделению системы на независимые подсистемы, а скорее формируют модулированный потенциальный ландшафт, в котором носители сохраняют способность к делокализованному движению через туннельные переходы. Примечательно, что увеличение количества барьеров при условии их равномерного распределения не нарушает целостности волновой функции, а лишь вносит в её пространственный профиль

периодические осцилляции, амплитуда которых зависит от геометрии барьеров. Такое поведение объясняется подавлением локализации за счёт значительного перекрытия волновых функций между соседними областями ямы, разделёнными барьерами, что подтверждается анализом коэффициентов туннельной прозрачности и энергетического спектра системы.

Данный эффект подчёркивает, что при определённых параметрах барьеров (толщина, высота, периодичность) квантовая яма ведёт себя как эффективно непрерывная среда с модифицированными оптическими и транспортными свойствами, а не как набор изолированных подъям. Это наблюдение имеет важное значение для проектирования устройств, где требуется управление волновой функцией без радикального изменения топологии системы, таких как широкополосные фотоприёмники или резонансно-туннельные транзисторы. Экспериментально наблюдаемая слабая модуляция волновой функции, аналогичная профилю в пустой яме, позволяет предположить, что введение барьеров может использоваться для тонкой настройки оптических переходов и плотности состояний без существенного снижения интегрального поглощения, что открывает новые возможности в инженерии квантово-размерных структур для оптоэлектронных приложений.

### 1.3.2 Исследование размытия гетерограниц на положение подзон в КЯ

В данном разделе проведено исследование размытия гетерограниц на положение подзон в КЯ.

$$x_{eff} = \frac{1}{d_w} \sum_{n=1}^N x_n d_n \quad (1.6)$$

где  $d_n$  — ширина  $n$ -го барьера  $Al_xGa_{1-x}As.$ ,  $d_w$  — ширина квантовой ямы.

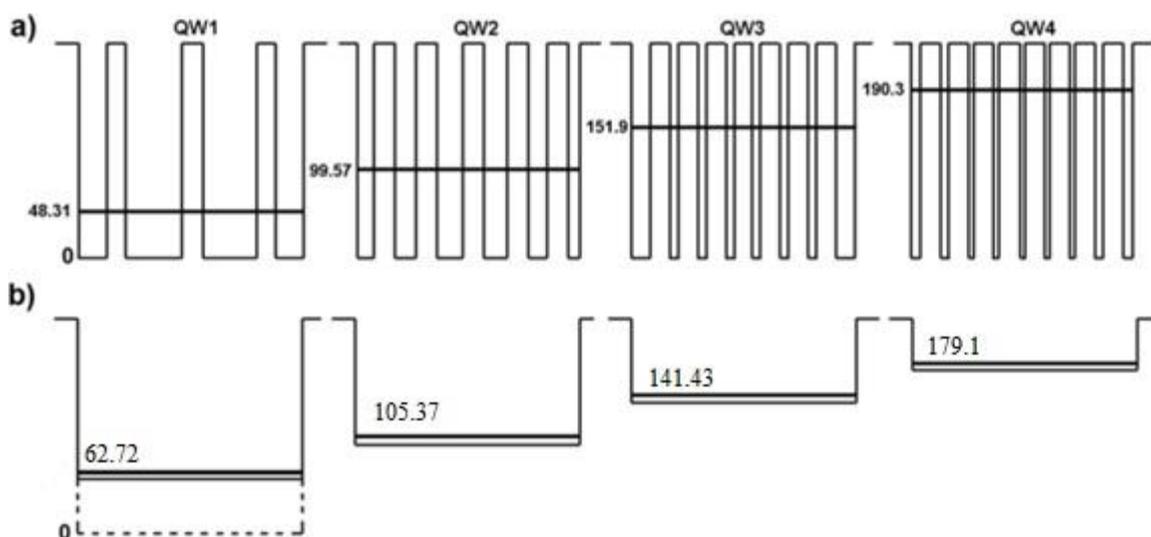
Используя это простое предположение, можно рассчитать эффективную концентрацию Al в каждой из КЯ, рассмотренных на рис. 1.1. Чтобы визуализировать этот эффект, мы представляем ожидаемые положения подзон в обоих случаях:

- а) пока мы считаем границы раздела резкими;
- б) мы предполагаем, что атомы Al от каждого из барьеров диффундируют в КЯ, давая среднюю концентрацию Al ( $x_{eff}$ ).

Рассчитанные положения нижних подзон для обоих случаев показаны на рис. 1.2 и сведены в таблицу 1.3 для наглядности. Где  $E_1$  - рассчитанное положение нижней подзоны для резких границ раздела, а  $E_{1eff}$  - то же самое для КЯ с равномерно распределенным Al.

**Таблица 1.3** Расчетные энергии нижней подзоны ( $E_{1eff}$  — энергия нижней подзоны в КЯ с однородным распределением Al,  $E_1$  — энергия низшей подзоны в КЯ с вставленными барьерами).

№ КЯ	Количество барьеров	$x_{eff}$	$E_{1eff}$	$E_1$	Различие, %
1	3	0.081	62.72	48.31	29.8
2	5	0.136	105.37	99.57	6.82
3	7	0.19	141.43	151.9	5.89
4	8	0.218	179.09	183.4	3,25



**Рисунок 1.2** Сравнение профилей структуры с введенными барьерами (а) и случаем равномерного эквивалентного распределения Al в квантовой яме (б).

По результатам видно, что разница между этими двумя энергиями уменьшается с увеличением числа барьеров в КЯ. Однако тут важно сказать, что по мере увеличения количества барьеров, возрастает количество гетерограниц в квантовой яме. Данный аспект приводит к незначительному уширению уровней размерного квантования за счет процессов рассеяния на гетерограницах.

### 1.3.3 Обработка алгоритма подбора конфигурации встраиваемых барьеров

Далее приведено описание алгоритма прецизионного управления подзонами в КЯ посредством введения в их объём тонких туннельно-прозрачных барьеров. Определению конфигурации вводимых барьеров и посвящен этот раздел. На основании наблюдений, сделанных в предыдущем разделе, можно предложить простой алгоритм получения параметров структуры для заданного положения основной подзоны и полного спектра энергий квантовой ямы. Предположим, что энергия подзоны  $E_1$  должна быть достигнута в

квантовой яме  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}$  шириной  $d_w$ . Во-первых, рассчитаем эффективную концентрацию Al для достижения требуемой энергии подзоны:

$$x_{eff} = \frac{E_1 - E_1^0}{800} \quad (1.7)$$

Где  $E_1^0$  - энергия нижней подзоны в КЯ без каких-либо барьеров (в нашем случае энергия подзоны соответствует КЯ шириной 25 нм.),  $800 \cdot x$  - глубина электронной квантовой ямы в системе  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}$ . Затем рассчитаем количество барьеров, которые необходимо вставить, используя значение  $x_{eff}$ , полученное по уравнению. (1.7):

$$N = \frac{x_{eff} \cdot d_w}{x \cdot d_B} \quad (1.8)$$

где  $d_B$  – ширина встроенного барьера.

Для примера воспользуемся значениями:  $x = 0,3$ ,  $E_1 = 100$  мэВ,  $d_w = 25$  нм,  $d_B = 2,264$  нм (8 монослоев), тогда имеем  $x_{eff} = 0,118$  и  $N = 4$ . В табл. 1.4 приведены расчетные значения для различных значений  $N$ . Результаты показывают небольшое отклонение рассчитанных значений  $E_1$  от заданных. Дополнительная точная настройки параметров барьеров может еще больше повысить точность.

**Таблица 1.4** Расчетные положения нижних подзон с использованием предложенного алгоритма.

$E_1^0$ , мэВ	$x_{eff}$	Количество барьеров	Рассчитанные $E_1$ , мэВ	Различие, %
67.2	0.081	3	62.71	7.1
87	0.108	4	83.96	4.8
106	0.135	5	110.2	3.8
130	0.163	6	134.36	3.2
152	0.191	7	156.04	2.6
174	0.217	8	179.09	2.8

В результате проведенного исследования было установлено, что при помощи данного алгоритма, возможно, эффективно подбирать количество барьеров, необходимых для достижения заданных положений подзон в квантовых ямах. Данный алгоритм демонстрирует высокую степень согласованности с исследуемым методом, особенно при условии равномерного распределения барьеров по объему квантовой ямы. Дополнительная настройка конфигурации встраиваемых барьеров позволяет достичь более точной регулировки положений подзон, а также оптимизировать их распределение.

### 1.3.4 Оценка эффективности поглощения и темпов оптической генерации

Основной акцент в данной главе был сделан на исследовании процессов эффективного извлечения носителей из серии квантовых ям в непрерывный спектр по реализованным резонансно-туннельным каналам. Обеспечение эффективного выноса фотоносителей является необходимым условием для повышения эффективности фотоэлементов. Для оценки эффективности встраиваемой структуры в p-i-n переход необходимо определить эффективность выноса носителей, долю вышедших в непрерывный спектр электронно-дырочных пар на единичный квант поглощенной энергии. Для этого проведем оценку величины темпа генерации и коэффициента оптического поглощения для квантовых ям с ведённой серией тонких туннельно-прозрачных барьеров определенной конфигурации.

При введении в активную область p-i-n перехода последовательности квантовых ям, происходит расширение спектральной чувствительности фотоэлектрического устройства. Тем самым, происходит увеличение спектрального диапазона поглощения структурой (рисунок 1.3), что в перспективе должно приводит к увеличению эффективности фотоэлектрического устройства при условии эффективного выноса фотоносителей из квантовых ям в непрерывный спектр.

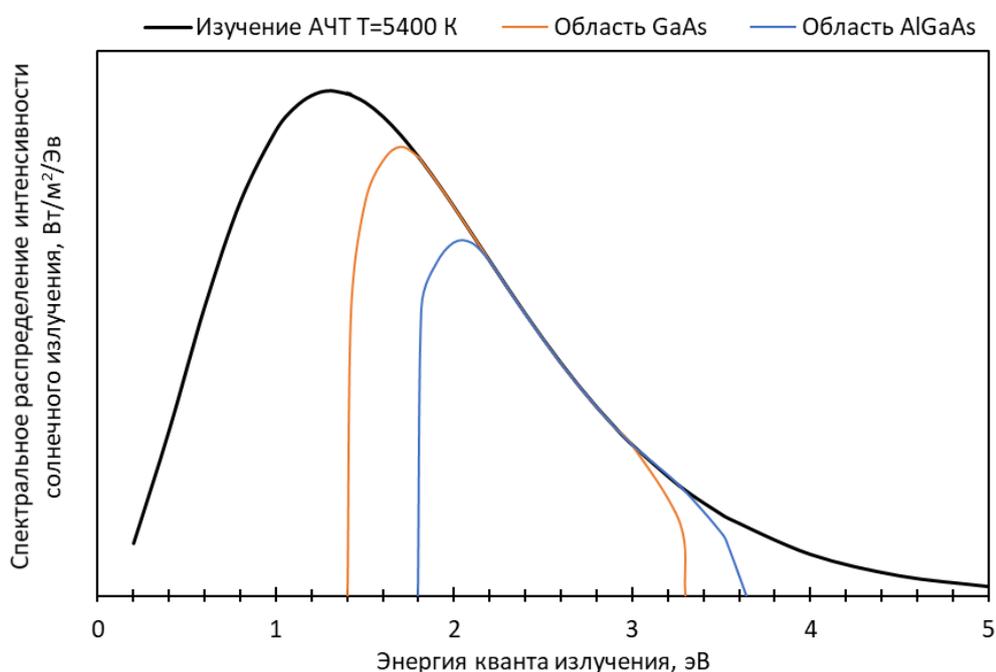


Рисунок 1.3 Спектральная область поглощения от введённой серии квантовых ям

Коэффициент межзонного поглощения в квантовой яме определяется следующим выражением [24]:

$$\alpha(h\omega) = \frac{1}{I_0(h\omega)} \left| \frac{dI(h\omega)}{d\omega} \right| = \frac{1}{I_0} \frac{W_{vc} h\omega}{V}, \quad (1.9)$$

Где  $W_{vc}$  – темп генерации электронно-дырочной пары в квантовой яме;  $I_0(h\omega)$  – интенсивность падающей волны (энергия, пересекающая единицу площади за единицу времени);  $V = SL_{qw}$ ,  $L_{qw}$  - ширина квантовой ямы.

Темп генерации электронно-дырочной пары в квантовой яме [24]:

$$W_{vc} = S \frac{4\pi^2 e^2}{nc\omega m_0^2} \frac{I_0}{h\omega} |X_{v_e, v_h}|^2 |\hat{e} \cdot \hat{p}_{v,c}|^2 \rho_\mu^{2D} \cdot \Theta(h\omega - E_g - \varepsilon_{v_e} - \varepsilon_{v_h}), \quad (1.10)$$

$$X_{v_e, v_h} = \int_{-\infty}^{\infty} dz \psi_{v_h}^*(z) \psi_{v_e}(z), \quad (1.11)$$

$$|\hat{e} \cdot \hat{p}_{v,c}| = \frac{1}{\Omega} \int dr u_{v,k}^*(\vec{r}) (\hat{e} \cdot \hat{p}) u_{c,k}(\vec{r}), \quad (1.12)$$

$$\rho_\mu^{2D} = \frac{\mu e h}{\pi h^2}, \quad (1.13)$$

Где  $n$  – показатель преломления среды квантовой ямы,  $n = 3,65$ ;  $h$  - постоянная Планка,  $6,582 \times 10^{-16}$  эВ·с;  $c$  – скорость света в вакууме,  $c = 3 \cdot 10^8$  м/с;  $h\omega$  - энергия излучения кванта, эВ;  $X_{v_e, v_h}$  - интеграл перекрытия электронной и дырочной волновых функций,  $|\hat{e} \cdot \hat{p}_{v,c}|$  - дипольный матричный элемент,  $\hat{e}$  – вектор поляризации электромагнитной волны.

Коэффициент оптического межзонного поглощения в квантовых ямах:

$$\alpha(h\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{nc\omega m_0^2} |X_{v_e, v_h}|^2 |\hat{e} \cdot \hat{p}_{v,c}|^2 \frac{\rho_\mu^{2D}}{L_{qw}} \cdot \Theta(h\omega - E_g - \varepsilon_{v_e} - \varepsilon_{v_h}), \quad (1.14)$$

Для расчета темпа генерации в квантовых ямах воспользуемся выражением (1.14) при учете спектральной плотности электромагнитной энергии [ ].

$$I_0(h\omega, T) = \frac{(h\omega)^3}{4\pi^2 c^2 h^2} \cdot \frac{1}{e^{h\omega/k_b T} - 1}, \quad (1.15)$$

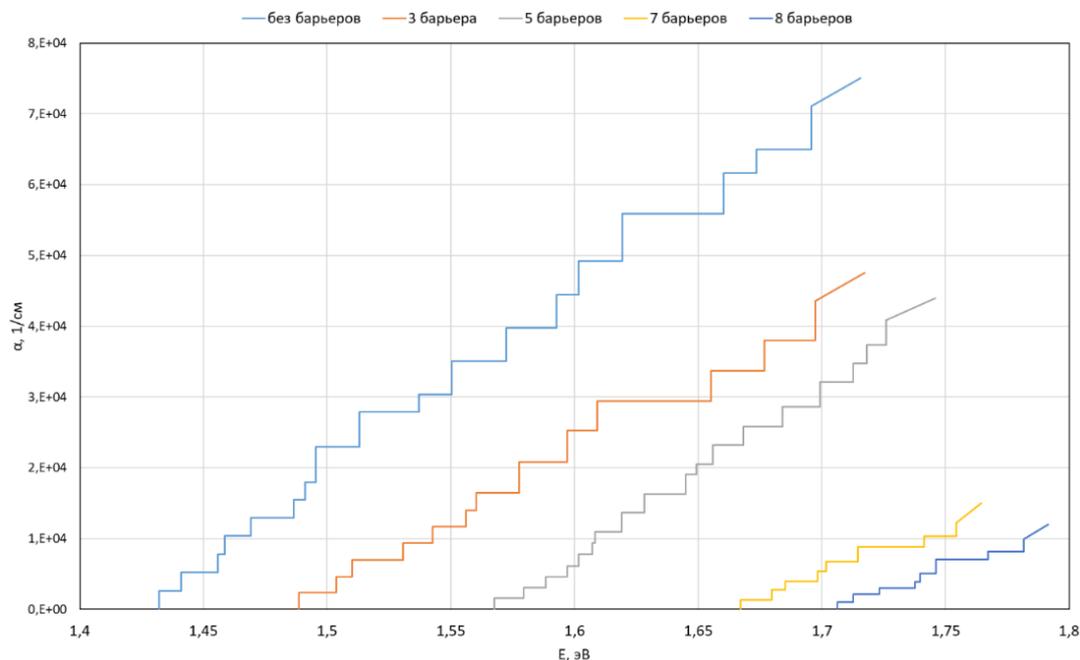
Тогда темп оптической генерации определяем выражением:

$$G = \int_0^\infty \frac{dW_{vc}}{S} = \frac{e^2}{nc^3 m_0^2} \cdot |X_{v_e, v_h}|^2 |\hat{e} \cdot \hat{p}_{v,c}|^2 \rho_\mu^{2D} \int_0^\infty \frac{h\omega}{e^{h\omega/k_b T} - 1} \Theta(h\omega - E_g - \varepsilon_{v_e} - \varepsilon_{v_h}), \quad (1.16)$$

Получаем, что коэффициент оптического межзонного поглощения и темп генерации зависят от квадрата дипольного матричного элемента с учетом поляризации электромагнитной волны  $|\hat{e} \cdot \hat{p}_{v,c}|^2$ , интеграла перекрытия волновых функций электронной и дырочных подсистем  $|X_{v_e, v_h}|$  (задает правило отбора для оптических переходов) и двумерной функции плотности состояний  $\rho_\mu^{2D}$ .

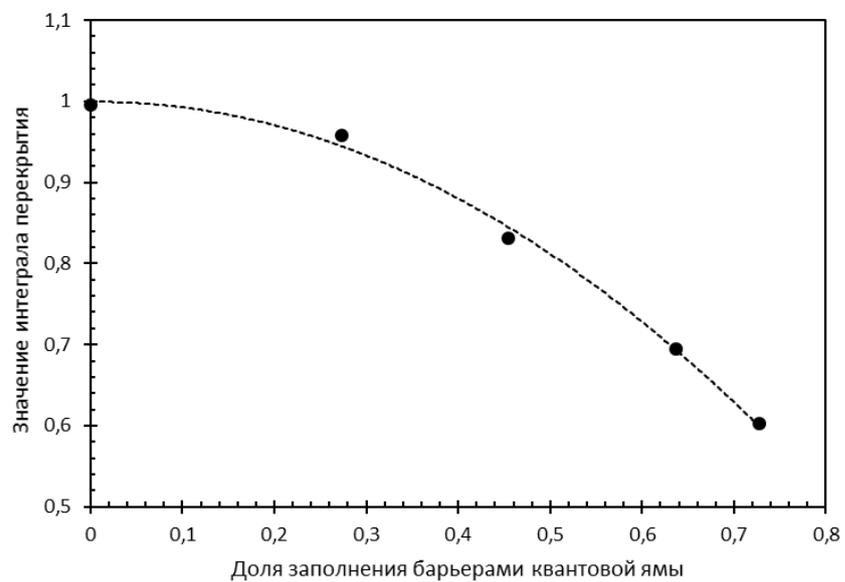
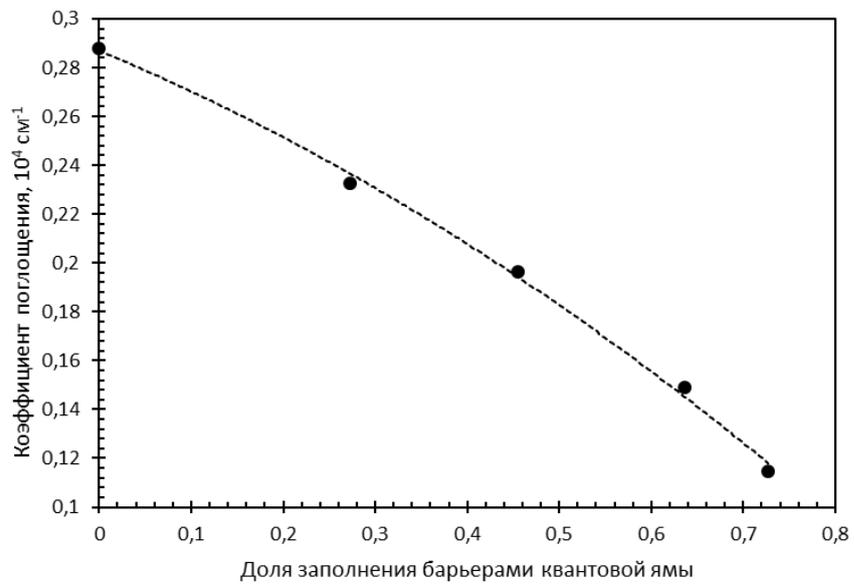
Далее проведем расчет коэффициента поглощения (1.14) в квантовых ямах (рисунок 1.4) с введённой серией тонких туннельно-прозрачных барьеров. Результаты

расчетов приведены в виде зависимости коэффициента поглощения от энергии поглощаемого кванта на рисунке 1.5.



**Рисунок 1.4** Зависимость коэффициента поглощения для квантовых ям с введённой серией тонких барьеров.

Исследуемые зависимости коэффициента поглощения и спектральной области поглощения от глубины квантовой ямы и степени заполнения её объёма барьерами демонстрируют выраженную корреляцию с параметрами размерного квантования и перекрытием волновых функций носителей. Наибольшие значения коэффициента поглощения и спектрального диапазона наблюдаются для наиболее глубокой квантовой ямы (№4), что обусловлено формированием более полной системы дискретных энергетических уровней с минимальной энергией межзонных переходов и максимальным пространственным перекрытием электронных и дырочных волновых функций. Однако введение дополнительных туннельно-прозрачных барьеров в объём ямы приводит к прогрессирующему снижению, как величины коэффициента поглощения, так и ширины спектральной полосы. Этот эффект объясняется уменьшением числа доступных уровней размерного квантования вследствие сдвига положения основной подзон в сторону увеличения энергии, что увеличивает энергию переходов между основными подзонами и снижает интегралы перекрытия волновых функций.

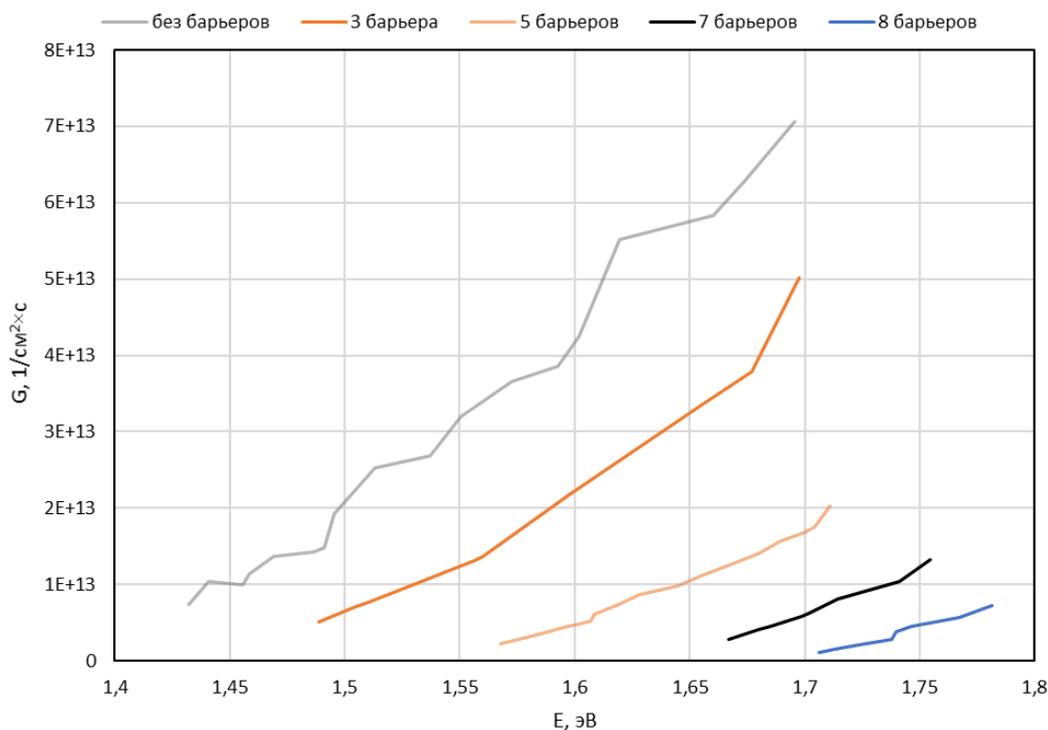


**Рисунок 1.5** Зависимость значения коэффициента поглощения (а) и интеграла перекрытия (б) для перехода  $hh1 - e1$  (а) от доли заполнения барьерами объема квантовой ямы

Указанная тенденция подтверждается зависимостью интегралов перекрытия для переходов тяжёлых дырок первого уровня (hh1) и электронов первого уровня (e1), представленной на рис. 1.5, где увеличение плотности барьеров в яме сопровождается экспоненциальным спадом значений интегралов. Такое поведение связано с модуляцией волновых функций на потенциальных барьерах, что нарушает их пространственную синхронизацию и снижает матричные элементы оптических переходов. Полученные результаты подчёркивают компромисс между управлением энергетическим спектром посредством барьерной инженерии и сохранением высоких оптических характеристик, что требует тщательной оптимизации геометрии структуры для конкретных приложений. Например, в фотодетекторах, чувствительных к узкому спектральному диапазону, умеренное введение барьеров может быть полезным для селективного усиления поглощения, тогда как в широкополосных фотоэлектрических элементах предпочтительнее минимизировать их количество для сохранения интегральной эффективности преобразования.

Для получения суммарного поглощения в серии квантовых ям проинтегрируем по энергии полученные зависимости для квантовых ям (№ 1 – 5), умножив на ширину квантовой ямы ( $25 \cdot 10^{-7}$  см) и на 100 %. Суммарное поглощение в серии квантовых ям (№1 = 0,545 %; №2 = 0,375 %; №3 = 0,145 %; №4 = 0,0712 %; №5 = 0,0372 %) равно 1,067 %.

Для определения темпа генерации в рассматриваемой структуре воспользуемся выражением (1.16). Результаты расчетов приведены в виде зависимости темпа генерации от энергии кванта излучения на рисунке 1.6.



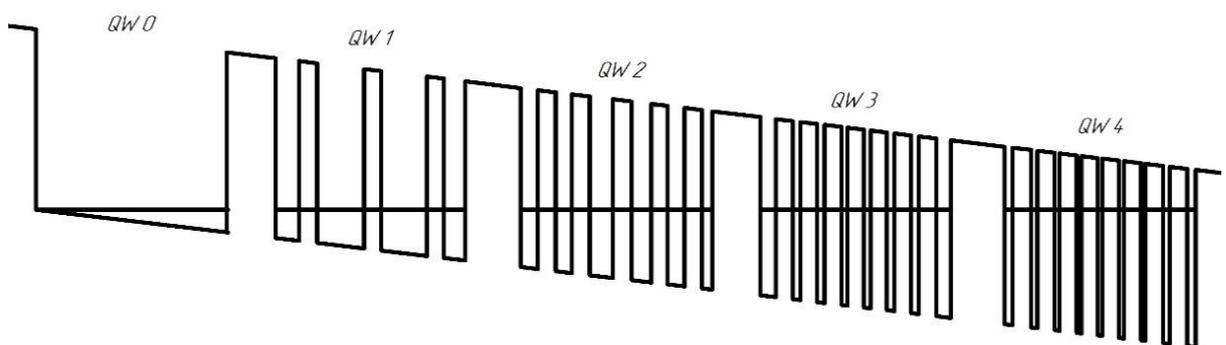
**Рисунок 1.6** Зависимость темпа генерации от энергии кванта для квантовых ям с внесенными барьерами.

Получаем, что по мере увеличения степени заполнения барьерами квантовой ямы (количества барьеров) темп генерации снижается, что объясняется аналогично случаю уменьшения коэффициента поглощения в квантовых ямах с введенной серией тонких барьеров. Полученные значения по темпу генерации в квантовой яме №4 использовали в разделе 3 для расчета процессов кинетики в резонансно-туннельной структуре.

### 1.3.5 Использование метода в фотоэлектрических приложениях

Исследуемый метод управления энергетическими подзонами в квантовых ямах посредством интеграции туннельно-прозрачных барьеров демонстрирует значительный потенциал для применения в фотоэлектрических устройствах, в частности, в фотовольтаических элементах на основе квантовых ям, где эффективное извлечение фотогенерированных носителей из глубоких потенциальных ям остается критической задачей. Разработанный подход позволяет создавать каскадные последовательности квантовых ям с резонансно согласованными подзонами, что обеспечивает направленный транспорт электронов через систему барьеров за счет механизма резонансного туннелирования. В качестве примера на рис. 1.7 представлена расчетная структура на основе  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ , в которой резонансное согласование энергетических уровней

достигается в собственном электрическом поле *i*-области *p*-*i*-*n* перехода. Напряженность поля в *i*-слое, составляющая  $1.5 \times 10^4$  В/см, была определена путем решения одномерного уравнения Пуассона [27] для типичных параметров перехода: концентрации легирования доноров и акцепторов  $1 \times 10^{17}$  см<sup>-3</sup>, ширины *i*-слоя 1 мкм и температуры 300 К. Расчеты показали, что при ширине барьеров 5 нм между соседними ямами падение напряжения на каждом барьере достигает 45 мэВ, что соответствует линейному градиенту потенциала, необходимому для синхронизации подзон в условиях внешнего поля. Такое падение напряжения не только компенсирует энергетический сдвиг, вызванный электрическим полем, но и обеспечивает выполнение условия резонанса  $E_i = E_j + eF\Delta z$ , где  $\Delta z$  — расстояние между центрами ям. Рассчитанные положения подзон для электронной подсистемы приведены ранее в Таблице 1.2. Видно, что резонансное согласование обеспечивается с точностью, намного лучшей, чем уширение  $k_B T$  при комнатной температуре (26 мэВ).



**Рисунок 1.7** Профиль структуры серии КЯ со вставленными барьерами в собственном электрическом поле *p*-*i*-*n* перехода. Ширина КЯ 25 нм, ширина вставленных барьеров 2,264 нм. (8 монослоев).

Проведённые исследования подтверждают, что разработанный метод управления энергетическими подзонами в квантовых ямах (КЯ) посредством интеграции туннельно-прозрачных барьеров является эффективным инструментом для реализации резонансного туннельного транспорта электронов. Ключевым достижением метода стала возможность прецизионного согласования нижних подзон в условиях электрического поля *p*-*i*-*n* перехода. В условиях *p*-*i*-*n* перехода линейный градиент потенциала ( $\Delta V = eF\Delta z$ ) вызывает сдвиг энергетических уровней между соседними ямами. Разработанный метод компенсирует этот сдвиг за счёт возможности точного управления положениями подзон в квантовых ямах путем подбора заданной конфигурации барьеров. Динамическое управление положениями подзон и локализацией волновых функций создает предпосылки

для разработки более совершенных решений в области технологий, включая фотовольтаические элементы и оптоэлектронные устройства.

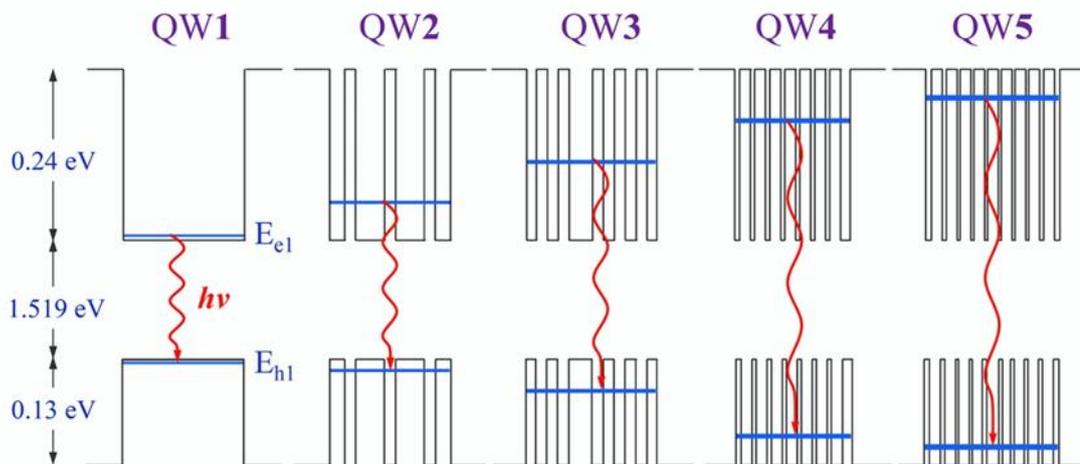
Кроме того, исследуемый метод позволяет изменять степень локализации волновых функций, как в самих квантовых ямах, так и в барьерах между ними. Это открывает новые перспективы для воздействия на процессы туннелирования, происходящие между соседними квантовыми ямами. Таким образом, важно отметить, что возможность управления этими параметрами не только оптимизирует транспортные свойства, но и может существенно повлиять на эффективность работы полупроводниковых устройств, основанных на таких структурах. Это позволяет существенно снизить вероятность рекомбинации за счет сокращения времени пребывания носителей в области генерации. Важно отметить, что предложенная методика предоставляет возможность динамической настройки параметров барьеров, что открывает перспективы для адаптации структур под различные спектральные диапазоны и условия эксплуатации, включая высокоинтенсивное освещение и повышенные температуры. Результаты работы подчеркивают ключевую роль точного управления подзонами в проектировании фотоэлектрических устройств, где сочетание резонансного транспорта и подавления потерь на рекомбинацию становится основой для повышения эффективности работы ФЭП.

### **1.3.5 Экспериментальная проверка исследуемого метода**

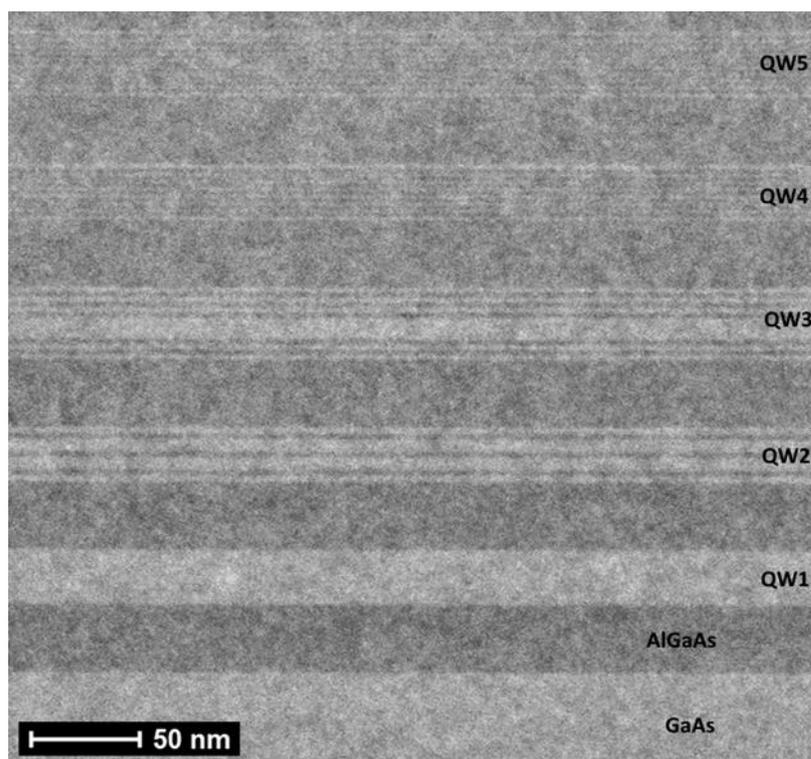
Далее было проведено сравнение полученных теоретических результатов с данными экспериментального исследования разрабатываемого метода полученными в лаборатории терагерцовой спектроскопии твердого тела ФИАН им. П.Н. Лебедева. Для этого были выращены модельные гетероструктуры AlGaAs/GaAs с квантовыми ямами (Рис. 1.1) методом молекулярно-пучковой эпитаксии на установке Riber Epineat 3-5. Рост гетероструктуры был выполнен н.с. ФИАН им. П.Н. Лебедева Пашкеевым Д.А. в АО «НПО «Орион». Рентгеноструктурный анализ проводился в.н.с. ФИАН им. П.Н. Лебедева Мартовицким В.П. Микроструктурный анализ структуры проводился зав. лабораторией электронной микроскопии Института кристаллографии имени А. В. Шубникова РАН Васильевым А.Л. Результаты фотолюминесценции исследуемой структуры получены с.н.с. лаборатории терагерцовой спектроскопии твердого тела ФИАН им. П.Н. Лебедева Савиновым С. А. Профиль структуры с квантовыми ямами приведен на рис. 1.8.

Наличие и последовательность барьеров в выращенных структурах проверялись методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и рентгеновским

дифракционным анализом (РДА). На рисунке 1.9 наглядно виден контраст между слоями GaAs (более светлые полосы) и слоями  $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$  (более темные полосы).



**Рисунок 1.8** Потенциальный профиль выращенных структур с квантовыми ямами GaAs/ $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$  с различной конфигурацией введенных барьеров.

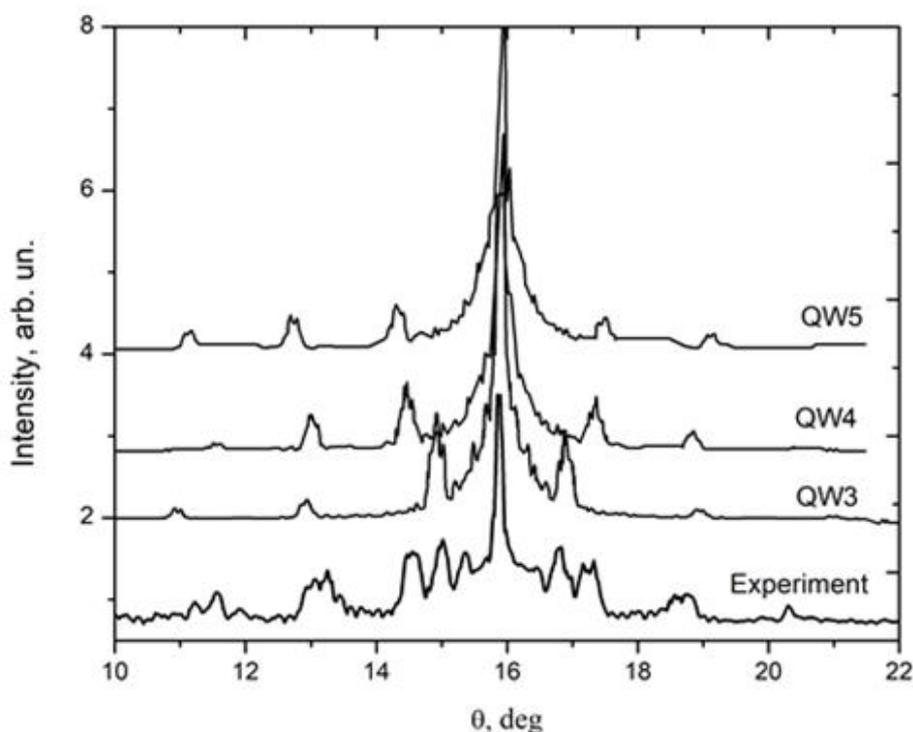


**Рисунок 1.9** Поперечное сечение выращенной гетероструктуры GaAs/ $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ , полученное с помощью ПЭМ.

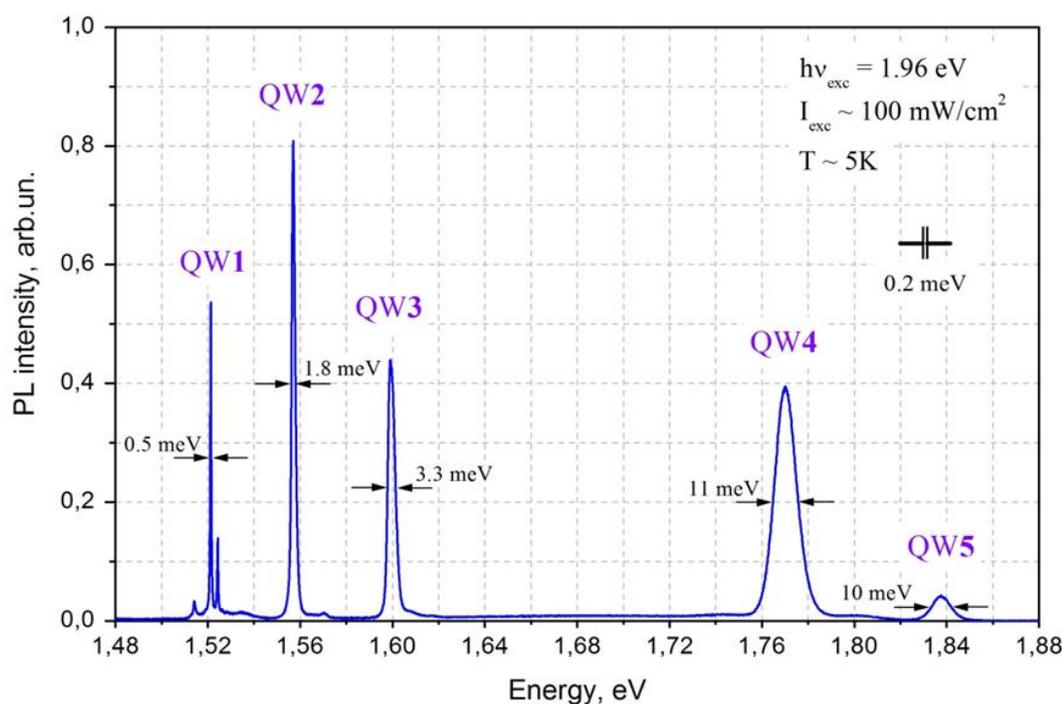
На рисунке 1.10 приведена дифрактограмма исследованной структуры из пяти квантовых ям в окрестности рефлекса (002) решетки GaAs. Видно неплохое совпадение экспериментально наблюдаемых положений спутников с расчетными. При большом угле

дифракции на рефлексе (117) ( $\theta_{(117)}=76.67^\circ$ ) была определена концентрация алюминия, которая оказалась чуть больше технологической (0.323). Угловые положения двух главных сателлитов на рефлексах (117) и (004) соответствовали толщинам слоев в 30 нм  $\text{Al}_{0.323}\text{Ga}_{0.677}\text{As}$ , разделяющим квантовые ямы.

Результаты рассчитанных спектров были сопоставлены с данными эксперимента, полученными из спектров фотолюминесценции гетероструктур  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$  с квантовыми ямами. Измеренные спектры фотолюминесценции выращенной структуры приведены на Рисунке 1.11. Видно, что энергии переходов, возрастают по мере увеличения числа введенных барьеров, тем самым отражая обусловленный введением барьеров сдвиг нижних подзон электронов и дырок в сторону больших энергий. Этот результат подтверждает возможность изменения положения уровней размерного квантования в квантовых ямах путем введения туннельно-прозрачных барьеров заданной конфигурации.



**Рисунок 1.10** Экспериментальные и расчетные дифрактограммы исследованных структур.

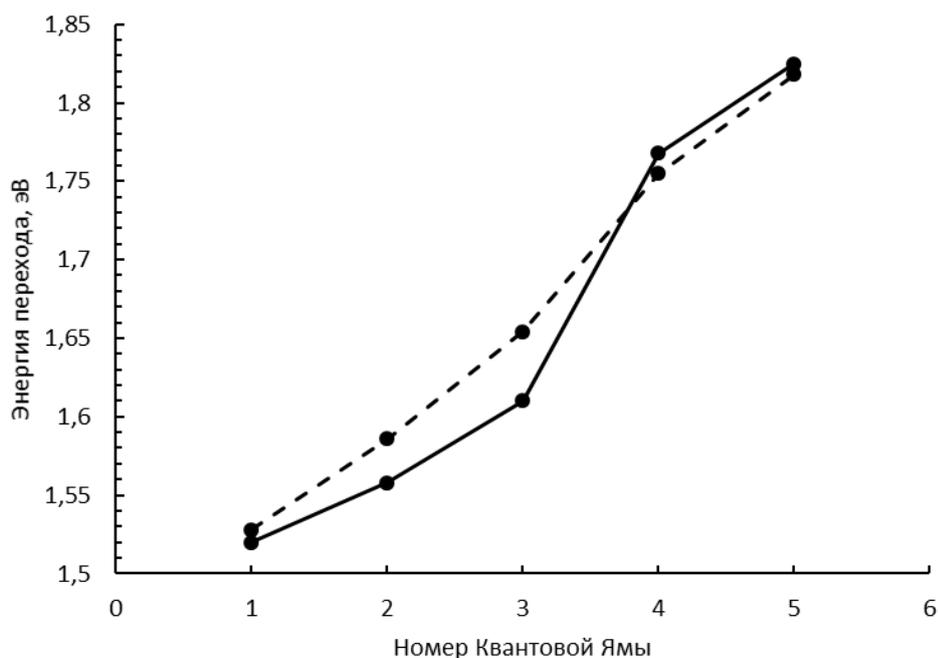


**Рисунок 1.11** Спектры низкотемпературной фотолюминесценции квантовых ям GaAs/Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>As с введенными барьерами.

В целом наблюдается неплохое соответствие положений линий ФЛ с расчетными значениями (таблица 1.5). Однако некоторое расхождение между ними все же наблюдается. Более детально этот вопрос будет рассмотрен в главе 2, и указанное расхождение будет объяснено экситонными эффектами. А пока на рисунке 1.12 приведено сравнение экспериментальных и рассчитанных значений энергий переходов для исследуемых квантовых ям.

**Таблица 1.5** Сравнение экспериментальных и рассчитанных значений энергий переходов для исследуемых квантовых ям.

№ КЯ	Эксперимент, мэВ	Расчет, мэВ
1	1,52	1,528
2	1,558	1,586
3	1,61	1,654
4	1,768	1,755
5	1,825	1,818



**Рисунок 1.12** Сравнение экспериментальных и рассчитанных значений энергий переходов для исследуемых квантовых ям. Черная линия соответствует экспериментальным значениям, пунктирная – расчётным.

#### 1.4 Выводы по главе

В данной работе предложен метод к контролю положений уровней размерного квантования в КЯ путём интеграции серии тонких туннельно-прозрачных барьеров в объём ямы. Этот метод, в отличие от классических стратегий (например, вариации ширины ям или состава барьерных слоёв), позволяет достичь прецизионного согласования энергетических уровней в условиях сильного электрического поля, характерного для р-і-п переходов. Ключевая идея метода заключается во введении в область квантовой ямы тонких туннельно-прозрачных барьеров толщиной 2–3 нм, которые формируют периодический или аperiodический потенциал. Эти барьеры, будучи достаточно тонкими для обеспечения туннелирования, создают локальные возмущения, модифицирующие волновые функции электронов и дырок и обеспечивая сдвиг положения основной подзоны на требуемый диапазон энергии. Систематическое исследование метода позволило выявить преимущества метода, а именно квантование энергетических уровней с точностью до 1–2 мэВ, что на порядок превышает точность традиционных методов. Реализация режимов резонансного согласования подзон соседних квантовых ям за счёт управления положением основной подзоны путем введения барьеров заданной конфигурации. Предложенный метод позволяет проводить прецизионное управление энергетическими уровнями размерного квантования, сохраняя при этом ключевые

туннельные и оптические свойства всей структуры. Это возможно благодаря равномерному распределению барьеров в объёме квантовой ямы, что обеспечивает неизменность волновой функции в пространстве.

Экспериментально и теоретически было показано, что введение таких барьеров позволяет контролировать положение подзон и степень локализации волновой функции, обеспечивая практически непрерывное изменение энергетических уровней в широком диапазоне. Этот диапазон включает состояния с энергиями от дна квантовой ямы до значений, близких к краю непрерывного спектра. Кроме того, метод обеспечивает возможность настройки энергетических уровней с чрезвычайно высокой точностью, которая значительно превосходит типичное тепловое уширение на комнатной температуре, что делает этот подход перспективным для интеграции в современные устройства нанoeлектроники и фотоники. Также предложен алгоритм оптимального выбора конфигурации системы барьеров, включаемых в квантовую яму, с целью достижения заданных значений энергии нижней подзоны. Этот алгоритм позволяет с высокой точностью предсказывать энергию квантованных подзон в зависимости от числа и положения барьеров в пределах ямы.

Проведено исследование коэффициента поглощения и темпа оптической генерации в квантовой яме с введённой серией тонких туннельно-прозрачных барьеров заданной конфигурации. Установлено, что увеличение степени заполнения квантовой ямы барьерами, то есть увеличение их числа внутри объёма ямы, приводит к заметным изменениям в оптических свойствах структуры. В частности, с ростом количества барьеров наблюдается уменьшение коэффициента поглощения, снижение темпа оптической генерации, а также сужение спектрального диапазона поглощения. Эти эффекты напрямую связаны с изменением энергетической структуры системы: уменьшением числа разрешённых уровней размерного квантования, увеличением энергии межзонных переходов, а также снижением значений интегралов перекрытия волновых функций электронных и дырочных подзон. Количественный анализ показал, что суммарный коэффициент поглощения для серии исследованных квантовых ям составил 1,067 %, где для отдельных структур, в зависимости от числа барьеров, значения составляли: №1 — 0,545 %, №2 — 0,372 %, №3 — 0,145 %, №4 — 0,0712 %, №5 — 0,0372 %. Таким образом, с увеличением числа барьеров внутри квантовой ямы фиксируется закономерное уменьшение доли поглощения, что связано с энергетическим смещением нижних подзон.

Для подтверждения наблюдаемых результатов были представлены спектры фотолюминесценции выращенных структур. Спектры отчётливо демонстрируют сдвиг

энергий переходов в сторону более высоких значений по мере увеличения числа барьеров внутри квантовых ям. Этот феномен объясняется обусловленным введением барьеров каноническим смещением энергетических подзон электронов и дырок к более высоким энергиям. Таким образом, результаты подтверждают возможность точной и предсказуемой перестройки энергетического спектра квантовых ям путём регулирования числа и параметров внедрённых туннельно-прозрачных барьеров. Кроме того, проведённое спектральное измерение фотолюминесценции выявило достаточно хорошее соответствие экспериментально полученных положений энергетических переходов с теоретическими расчётами. Небольшие расхождения, тем не менее, имеют место. Они могут быть объяснены экситонными эффектами, которые приводят к дополнительным сдвигам энергий переходов. Данный аспект будет более детально рассмотрен во второй главе, где будет представлен углублённый анализ с учётом экситонных взаимодействий. Приведённые результаты свидетельствуют о высокой степени управляемости свойств квантовых ям при использовании серии туннельно-прозрачных барьеров, что открывает перспективы для дальнейшего совершенствования оптоэлектронных и фотонных устройств.

## Приложение 1.1

Одномерное уравнение Шредингера решаем в приближении параболического закона дисперсии эффективных масс методом огибающей функции.

$$\left\{ -\frac{\partial}{\partial z} \frac{\hbar^2}{2m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U_0(z) \right\} \varphi(z) = E\varphi(z), \quad (1.1.1)$$

где  $U_0(z)$  - потенциал квантовой ямы,

$$m(z) = \begin{cases} m_w, & z \in \text{яме} \\ m_b, & z \in \text{барьеру} \end{cases} \quad \text{- эффективная масса.}$$

Электроны и дырки в GaAs/AlGaAs описываются эффективными массами, различающимися в материалах ямы и барьеров. Формализм огибающей учитывает это через уравнения типа Кейна, а граничные условия Бен Даниэля-Дьюка обеспечивают непрерывность огибающей и потока вероятности.

Согласно граничным условиям Бен Даниэля-Дьюка на границе раздела яма-барьер  $z = z_0$  волновая функция имеют вид:

$$\begin{cases} \varphi(z_0 - 0) = \varphi(z_0 + 0) \\ \left[ \frac{1}{m(z)} \frac{\partial \varphi(z)}{\partial z} \right]_{z=z_0-0} = \left[ \frac{1}{m(z)} \frac{\partial \varphi(z)}{\partial z} \right]_{z=z_0+0} \end{cases} . \quad (1.1.2)$$

Решаем задачу с полной волновой функцией:

$$\psi(r, z) = \exp\{iqr\} \cdot \varphi(z), \quad (1.1.3)$$

где  $q$  – волновой вектор Блоха.

Волновые функции

$$\varphi(z \leq -a/2) = A \cdot \exp(\kappa_b(z + a/2)), \quad (1.1.4)$$

$$\varphi(-a/2 \leq z \leq a/2) = B \cdot \cos(\kappa_w(z + a/2)) + C \cdot \sin(\kappa_w(z + a/2)), \quad (1.1.5)$$

$$\varphi(z \geq a/2) = D \cdot \exp(-\kappa_b(z - a/2)), \quad (1.1.6)$$

$$\kappa_w = \sqrt{\frac{2m_w}{\hbar^2} E}, \quad (1.1.7)$$

$$\kappa_b = \sqrt{\frac{2m_b}{\hbar^2} (U_0 - E)}. \quad (1.1.8)$$

Решая уравнение (1.1.1) с учетом условий сшивки(1.1.2), взятых в точках  $z = \pm a/2$ , и условия (1.1.3), получаем

$$z = -a/2$$

$$A = B, \tag{1.1.9}$$

$$A \cdot \frac{\kappa_b}{m_b} = C \cdot \frac{\kappa_w}{m_w},$$

$$z = a/2$$

$$B \cdot \cos(\kappa_w a) + C \cdot \sin(\kappa_w a) = D, \tag{1.1.10}$$

$$-B \frac{\kappa_w}{m_w} \sin(\kappa_w a) + C \cdot \frac{\kappa_w}{m_w} \cos(\kappa_w a) = -D \frac{\kappa_b}{m_b},$$

Получаем:

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{\kappa_b}{m_b} & 0 & \frac{\kappa_w}{m_w} & 0 \\ 0 & \cos(\kappa_w a) & \sin(\kappa_w a) & 1 \\ 0 & -B \frac{\kappa_w}{m_w} \sin(\kappa_w a) & C \cdot \frac{\kappa_w}{m_w} \cos(\kappa_w a) & -\frac{\kappa_b}{m_b} \end{pmatrix}, \tag{1.1.11}$$

Далее для определения энергетического спектра необходимо найти решения при условии  $\text{Det } H = 0$ .

$$\frac{\kappa_b \kappa_w \cdot \cos(\kappa_w a)}{m_b^2} + \frac{\kappa_b \kappa_w \cdot \cos(\kappa_w a)}{m_w m_b} + \frac{\kappa_b^2 \cdot \sin(\kappa_w a)}{m_b^2} - \frac{\kappa_w^2 \cdot \sin(\kappa_w a)}{m_{bw}^2} = 0 \tag{1.1.12}$$

Далее решая трансцендентное уравнение, определяем спектр волновые функции состояний в квантовой яме.

## Приложение 1.2

Решение уравнения Шрёдингера методом конечных разностей для одномерного потенциала. Так как решить уравнения Шрёдингера аналитически для случая сложных потенциалов не представляется возможным, можно использовать для решения метод конечных разностей [37].

Суть метода заключается в дискретизации потенциала, в результате чего он превращается в сетку с постоянным шагом  $\Delta$ . Чем меньше шаг этой сетки – тем точнее будут рассчитаны уровни энергии и волновая функция, но тем более ресурсоёмкой будет задача. Представляя дифференциал в конечных разностях, получим следующую формулу:

$$\frac{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}}{\Delta x^2} - \frac{2m}{\hbar^2} U_n \psi_n = -E \frac{2m}{\hbar^2} \psi_n \quad (1.2.1)$$

Стационарное уравнение Шрёдингера в этом случае примет вид:

$$\sum_i H_{i,j} \psi_j = E \psi_j \quad (1.2.2)$$

где  $i$  – номер точки на координатной прямой.

Гамильтониан распишем через символы Кронекера:

$$H_{i,j} = \delta_{i,j} \left( V_i + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{2}{\Delta x^2} \right) + (\delta_{i-1,j} + \delta_{i+1,j}) \frac{-\hbar^2}{2m \Delta x^2} \quad (1.2.3)$$

Перебирая последовательно  $i$  и  $j$ , получим трёхдиагональную матрицу коэффициентов:

$$\begin{pmatrix} R_1 & 1 & & \\ 1 & R_2 & 1 & \\ & 1 & \dots & 1 \\ & & 1 & R_N \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \dots \\ \psi_N \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \dots \\ \psi_N \end{pmatrix} \quad (1.2.4)$$

$$\begin{aligned} R_N &= -2 - \frac{2m}{\hbar^2} U_N \Delta x^2 \\ \varepsilon &= -E \frac{2m}{\hbar^2} \Delta x^2 \end{aligned} \quad (1.2.5)$$

Вычислив от матрицы (1.1.4) собственные значения, получим набор уровней энергии, в которых может находиться частица в квантовой яме. Получив набор собственных векторов, мы получим точки относительного соответствующего этому вектору уровня энергии, по которым частица будет двигаться в исследуемой низкоразмерной структуре.

### Приложение 1.3

Численное решение уравнения Шрёдингера методом конечных разностей для двумерного потенциала. Рассмотрим двумерную квантовую яму, где мы хотим решить уравнение стационарной задачи Шрёдингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y) + V(x,y)\psi(x,y) = E\psi(x,y), \quad (1.3.1)$$

Чтобы применить метод конечных разностей, мы разбиваем область, где определена функция  $\psi(x,y)$ , на сетку с шагом  $h_x$  и  $h_y$  по осям  $x$  и  $y$  соответственно.

1. Дискретизация пространства:

- На сетке точки  $(i,j)$  будут иметь координаты  $x_i = x_0 + ih_x$  и  $y_j = y_0 + jh_y$ , где  $i$  и  $j$  — индексы точек сетки.

2. Вторые производные по пространственным координатам:

- Для функции  $\psi$  в точке  $(i,j)$  приближаем вторые производные по пространственным координатам с помощью конечных разностей:

$$\begin{aligned} \nabla^2\psi(x,y) = & \frac{\psi(x_{i+1},y_j) - 2\psi(x_i,y_j) + \psi(x_{i-1},y_j))}{h_x^2} + \\ & + \frac{\psi(x_i,y_{j+1}) - 2\psi(x_i,y_j) + \psi(x_i,y_{j-1}))}{h_y^2}, \end{aligned} \quad (1.3.2)$$

3. Подстановка в уравнение Шрёдингера:

В результате подстановки двух первых производных в уравнение Шрёдингера, мы получаем:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{h_x^2} + \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{h_y^2}\right) + V_{i,j}\psi_{i,j} = E\psi_{i,j}, \quad (1.3.3)$$

где  $\psi_{i,j} = \psi(x_i, y_j)$  и  $V_{i,j} = V(x_i, y_j)$  — потенциал в точке  $(i,j)$ .

4. Формирование системы линейных уравнений:

Можно привести это уравнение к виду:

$$\begin{aligned} \psi_{i,j} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{h_x^2} + \frac{1}{h_y^2} \right) + V_{i,j} - E \right) = \\ = \frac{\hbar^2}{2mh_x^2} (\psi_{i+1,j} + \psi_{i-1,j}) + \frac{\hbar^2}{2mh_y^2} (\psi_{i,j+1} + \psi_{i,j-1}), \end{aligned} \quad (1.3.4)$$

Эти уравнения можно записать в матричной форме, что позволяет решить систему линейных уравнений для получения значений функции  $\psi$  и энергии  $E$ .

Теперь для построения матрицы  $A$  мы будем использовать следующую структуру:

- Каждая строка матрицы соответствует уравнению для одной из точек сетки.
- Главные диагонали будут содержать элементы  $-\left(\frac{\hbar^2}{2mh_x^2} + \frac{\hbar^2}{2mh_y^2} + \frac{V_{i,j}}{E}\right)$ ;

Элементы вне главной диагонали будут равны  $\frac{\hbar^2}{2mh_x^2}$  и  $\frac{\hbar^2}{2mh_y^2}$ ;

Пусть у нас есть  $N_x$  точек по оси  $x$  и  $N_y$  точек по оси  $y$ , что дает в общей сложности  $N=N_x \times N_y$  точек. Мы будем индексировать точки сетки как  $i, j$  для  $x$  и  $y$  соответственно.

## ГЛАВА 2. ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ ЭКСИТОНОВ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ СО ВСТРОЕННОЙ СЕРИЕЙ ТОНКИХ ТУННЕЛЬНО-ПРОЗРАЧНЫХ БАРЬЕРОВ

### 2.1 Введение

Современное состояние полупроводниковой техники позволяет конструировать искусственные материалы – так называемые гетероструктуры [3], за счет управления элементарным составом материала в процессе роста кристалла. Это формирует потенциальные ямы и барьеры для электронов и дырок, изменяет энергетический спектр и пространственное распределение носителей тока. Процесс разработки современного устройства с заданными характеристиками, такими как длина волны излучения полупроводникового лазера или оптического приемника, предполагает тщательное моделирование с учетом важных характеристик перед дорогостоящим производством. Некоторые из важных особенностей оптического поглощения в полупроводниках приписываются экситонным модам. Экситонное состояние в плоском трехмерном пространстве без внешних полей давно известно и подробно описано [51-55], но введение профиля гетероструктуры существенно меняет картину. Известно, что размер и энергия связи экситона сильно различаются в полупроводниковых квантовых ямах, причем влияние параметров структуры не всегда тривиально [8]. Энергия связи экситона также зависит от ширины квантовой ямы и высоты потенциала барьера. Чем более узкая яма и чем выше барьер, тем больше вероятность, что электрон и дырка будут оставаться внутри ямы и создавать более сильное притяжение между собой.

Проблема управления положением нижней энергетической подзоны в квантовых ямах, а также эффективной шириной их запрещенной зоны приобретает ключевое значение для широкого спектра оптических и оптоэлектронных устройств. Особую важность эта задача имеет в приложениях, связанных с фотовольтаикой, где управление параметрами энергетической структуры квантовых ям открывает возможности для повышения эффективности преобразования и управления потоком энергии [3–7, 9–12]. Одним из наиболее перспективных подходов, направленных на решение указанной проблемы, является разработанный нами ранее метод, основанный на введении в квантовую яму системы тонких туннельно-прозрачных барьеров [4–7]. Этот метод позволяет значительно модифицировать свойства энергетического спектра структуры, что подтверждено теоретическими расчётами.

Согласно результатам модельных исследований, варьирование геометрических параметров, таких как толщина и пространственное расположение добавленных туннельно-прозрачных барьеров, открывает возможность тонкой настройки

энергетического положения нижней подзоны. В частности, реализуемые перестройки энергии нижней подзоны способны охватывать широкий диапазон значений, включая потенциальную возможность перехода к состоянию с практически непрерывным спектром уровней [5]. Такая гибкость параметров предоставляет дополнительные возможности для проектирования оптоэлектронных устройств с заданными характеристиками.

В рамках настоящего исследования проведено сравнение результатов исследуемой модели и экспериментальных спектров фотолюминесценции. По результатам сравнения получено экспериментальное подтверждение предлагаемого метода на возможность перестройки положения подзон в квантовой яме посредством введения серии тонких туннельно-прозрачных барьеров заданной конфигурации. В ходе экспериментов продемонстрирована управляемая перестройка положения нижних подзон, охватывающая широкий спектральный диапазон – от дна квантовой ямы вплоть до уровня непрерывного спектра. Полученные результаты указывают на значительный научный и практический потенциал метода для применения в передовых оптоэлектронных устройствах. Особый интерес представляет влияние введённых в квантовые ямы туннельно-прозрачных барьеров на такие фундаментальные аспекты, как энергия связи электронно-дырочной пары, т.е. экситонов. Эта проблема, имеющая ключевое значение, как для понимания физических процессов, так и для оптимизации параметров устройств, является центральной темой настоящей работы. Проведённое исследование позволяет лучше понять связь между конфигурацией барьеров и изменением экситонных свойств квантовых ям.

В работе проведены экспериментальные и теоретические исследования спектров фотолюминесценции (ФЛ) для квантовых ям (КЯ)  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  с различными конфигурациями встроенных туннельно-прозрачных барьеров. Основной задачей стало установление корреляции между геометрией потенциала (ширина ям, толщина и высота барьеров) и энергетическими характеристиками экситонных состояний, определяющих спектральные особенности ФЛ. Особенностью исследуемых структур является наличие тонких барьеров (2–3 нм) внутри широких КЯ (25 нм), что исключает возможность применения стандартных аналитических моделей [51–55, 65–70], основанных на приближениях бесконечно высоких барьеров или слабой связи между подзонами. Для точного определения энергии связи экситонов ( $E_b$ ) и волновых функций основного состояния использован метод прямого численного решения трехмерного уравнения Шрёдингера в приближении эффективной массы. Применение конечно-разностной схемы 2-го порядка позволило достичь точности  $\delta E_b \leq 0.5$  мэВ при умеренных вычислительных затратах (время расчёта — 95 мин на ядро CPU). Однако для структур с резкими

градиентами потенциала (барьеры толщиной  $< 2$  нм.) требуется переход к методам конечных элементов с адаптивной сеткой. Реализованный подход обеспечивает точную интерпретацию спектров ФЛ для КЯ с введенной серией тонких барьеров, что необходимо для проектирования оптоэлектронных устройств с управляемыми экситонными переходами. Полученные результаты подчеркивают ключевую роль прямого численного моделирования в условиях, когда стандартные приближения становятся неприменимыми.

## 2.2 Модель расчета экситонных состояний

Интерпретация спектров фотолюминесценции гетероструктур с квантовыми ямами (КЯ) требует учёта вклада экситонных переходов, которые формируются за счёт кулоновского взаимодействия электронов и дырок. Однако наличие тонких туннельных барьеров (толщиной 2–3 нм) в исследуемых структурах существенно усложняет расчёт энергий экситонных состояний. Стандартные приближения, такие как модель Френкеля [52,53] или Ванье-Мотта [54,55] требуют адиабатического разделение переменных, что выполнять нельзя из-за сильного влияния барьеров на волновые функции носителей. Это связано с тем, что тонкие барьеры формируют нелокальные потенциалы, нарушающие симметрию системы и приводящие к гибридизации экситонных состояний. Энергии электронных и дырочных подзон в исследованных структурах рассчитывались путем решения уравнения Шрёдингера методом огибающей в параболическом приближении. В рамках модели эффективной массы учтена параболическая дисперсия носителей, что допустимо для узкозонных материалов (GaAs) вблизи минимума зоны.

$$\left\{ -\frac{\partial}{\partial z} \frac{\hbar^2}{2m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) \right\} \psi(z) = E\psi(z) \quad (2.1)$$

где  $m(z)$  - эффективная масса электрона,  $U(z)$  - профиль потенциала квантовой ямы электрона.

Уравнение Шрёдингера для задачи двух частиц представляет собой 6-мерное уравнение в частных производных (т.е. для двух частиц, каждая в трехмерном пространстве). Такой расчет был проведен на основании метода конечно-разностной дискретизации [75]. В данной работе мы ограничиваемся расчетом только основного состояния  $1s$  экситона. В этом случае уравнение Шрёдингера сводится к трехмерному уравнению следующего вида (Приложение 2.1):

$$\hat{H}\psi(\rho, z_e, z_h) = E\psi(\rho, z_e, z_h), \quad (2.2)$$

$$\hat{H} = \hat{K} - \frac{e^2}{\epsilon\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} + V_e(z_e) + V_h(z_h), \quad (2.3)$$

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_h} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \right), \quad (2.4)$$

Здесь  $z_e$  и  $z_h$  - z-координаты электрона и дырки соответственно, а  $\rho$  - относительное расстояние между частицами в  $x$ -плоскости,  $V_e(z)$  и  $V_h(z)$  – потенциальный профиль квантовой ямы для электрона и для дырки, соответственно.  $m_e$ ,  $m_h$  и  $\mu$  - эффективные массы электронов, дырок и приведенная эффективная масса пары электрон-дырка, соответственно. В численных расчетах были использованы зонные параметры, взятые из работы [78]. Для дискретизации мы используем конечно-разностную аппроксимацию второго порядка в частных производных в уравнении (2.3) на эквидистантных сетках по трем переменным (Приложение 2.2).

Частицы в связанном состоянии локализованы в основном внутри ямы и близко друг к другу ( $z, \rho \rightarrow 0$ ), волновая функция обращается в нуль глубоко в барьерах и на больших расстояниях между частицами  $\rho \gg 1$ . Используя метод конечно-разностной дискретизации 2-го порядка определяем стационарное состояние экситона в квантовых ямах со встроенной серией тонких барьеров (Приложение 2.3). Размеры вычислительного пространства  $Z_{\max} \gg 1$ ,  $R_{\max} \gg 1$  выбираются достаточно большими, чтобы не влиять на решение. Основной проблемой в ходе решения является возможность попадания узла сетки на положение гетерограницы между барьером и интерфейсом квантовой ямы, что приводит к существенным отклонениям от реального значения основного уровня энергии экситона. Минимизировать данный эффект можно путем увеличения размерности сетки и уменьшения экстраполяции к нулевым шагам  $\Delta z \rightarrow 0$ . Учитывая, что пространственная дискретизация вносит систематическую ошибку, зависящую от размеров шага сетки  $\Delta z$ ,  $\Delta \rho$ , моделирование повторяется несколько раз для различных размеров сетки. Затем вычисленные значения энергии экстраполируются к нулевым шагам  $\Delta z \rightarrow 0$ ,  $\Delta \rho \rightarrow 0$  дающий реальный физический результат. Шаги сетки по каждой переменной приняты одинаковыми  $\Delta = \Delta_{z_e} = \Delta_{z_h} = \Delta_\rho$ , уравнение (2.2) определяет теоретическую неопределенность численного решения второго порядка  $\Delta^2$  как  $\Delta \rightarrow 0$ .

В результате мы вычислили методом Арнольди [91] наименьшее собственное значение матрицы и соответствующий собственный вектор. После экстраполяции к пределу  $\Delta = 0$  получаются точные асимптотические результаты. Определив энергию  $E_x(\Delta m, \Delta \varepsilon)$  для КЯ с различной конфигурацией введенных барьеров, можем перейти к расчету энергии связи экситона. Энергия связи экситона определяется как разность энергий стационарного состояния экситона и одночастичной задачи для электронов и дырок.

$$E_x = \varepsilon_e + \varepsilon_{hh} - E, \quad (2.5)$$

Где  $\varepsilon_e, \varepsilon_{hh}$  – энергия одночастичных состояний для электрона и дырки,  $E$  – энергия основного состояния экситона, эВ.

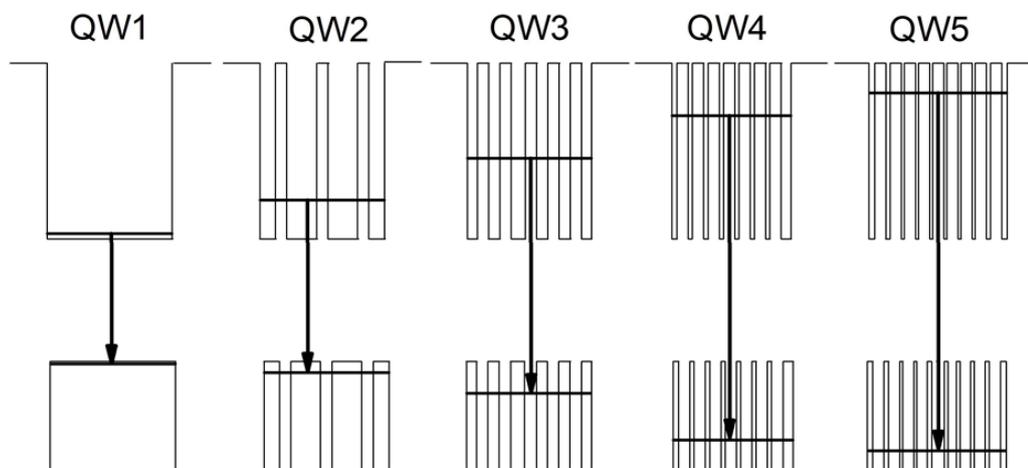
Расчеты энергий связи в зависимости от конфигурации встроенных тонких барьеров в квантовую яму были выполнены для модельных гетероструктур GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As с концентрацией алюминия 0.3. Параметры запрещенной зоны, использованные для решения задачи на собственные значения (2.1 и 2.2), основаны на данных из [78]. Стоит также отметить, что, несмотря на надежность теоретической модели и численного метода, приближение лежащей в основе огибающей функции, используемое для получения уравнения Шредингера, становится непригодным для очень тонких КЯ, а именно для ширины менее 2 нм., что составляет несколько монослоев GaAs [78]. Разработанный подход позволил определить вклад энергии связи экситонов в общий спектр фотолюминесценции с точностью. Это критически важно для оптимизации структур, применяемых в лазерах и однофотонных излучателях, где контроль над экситонными энергиями определяет рабочие характеристики устройств. Далее метод может быть расширен для учёта непараболичности зонной структуры и спиновых эффектов, что актуально для материалов с сильным спин-орбитальным взаимодействием (InSb, HgTe).

### 2.3 Исследованные структуры

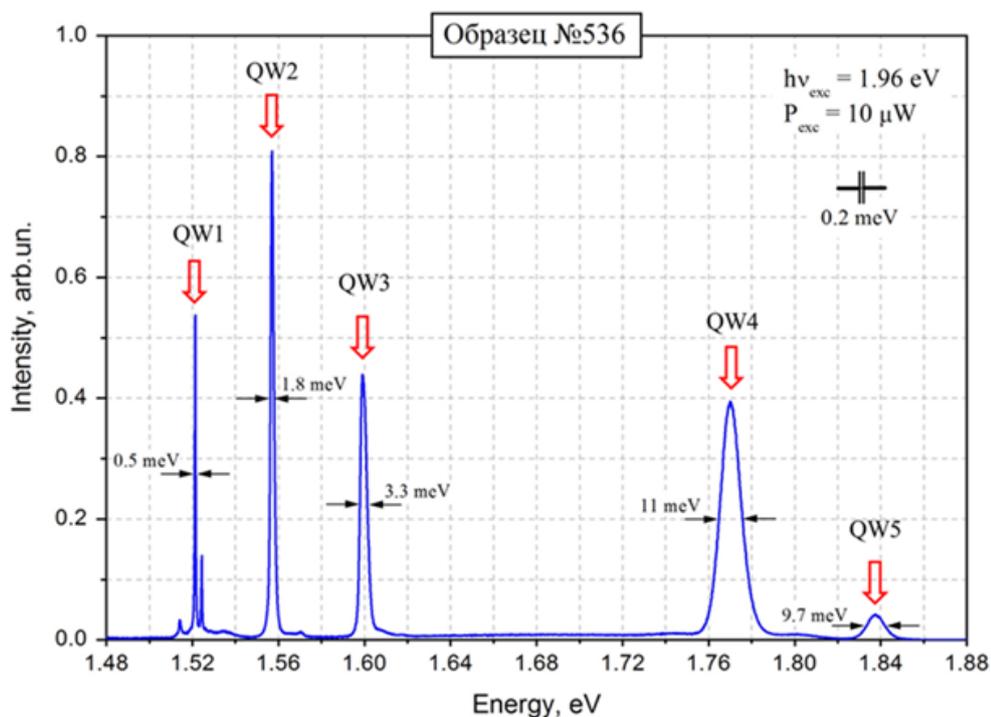
В работе рассмотрены структуры, представляющие собой квантовые ямы GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As фиксированной ширины с введенными в них сериями тонких (по сравнению с шириной ямы) туннельно-прозрачных барьеров, равномерно распределенных по объёму квантовой ямы. Изменение количества вводимых барьеров позволяет регулировать положение нижних подзон размерного квантования электронов и дырок [4-8]. Подчеркнем, что введение барьеров не разбивает рассматриваемую систему на отдельные слабо связанные квантовые ямы, и состояния носителей заряда в ней описываются едиными волновыми функциями, как показано на рисунке 1.1 в главе 1.

Схема структуры приведена на Рисунке 2.1. Пустая квантовая яма Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>As/GaAs имеет ширину 25 нм. Для следующих квантовых ям барьеры вводились в виде квазипериодических последовательностей с шириной 8 монослоев (2.264 нм), число и положение которых менялось от ямы к яме. Наличие и порядок следования барьеров в выращенных структурах было проверено методом рентгеноструктурного анализа. Спектры низкотемпературной люминесценции структуры (Рис. 2.2) измерялись

при температуре 5K на спектрометре SP-2356 с охлаждаемым матричным детектором PIXIS-100 при оптическом возбуждении излучением He-Ne лазера (0.63 мкм).



**Рисунок 2.1** Потенциальный профиль выращенных структур с квантовыми ямами GaAs/Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>As с различной конфигурацией введенных барьеров.



**Рисунок 2.2** Спектры низкотемпературной фотолюминесценции квантовых ям GaAs/Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>As с введенными барьерами.

## 2.4 Обсуждение результатов

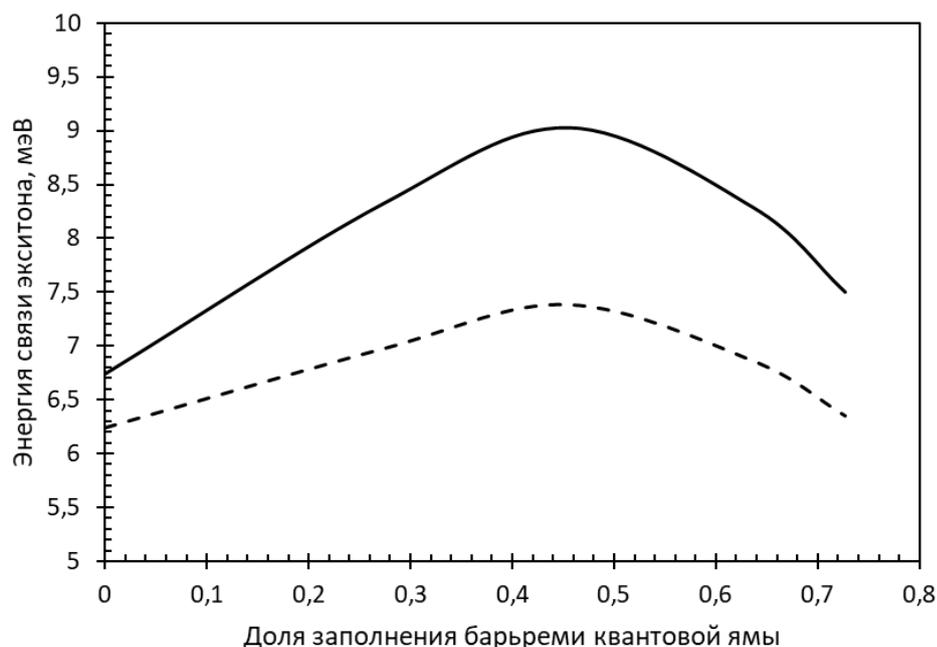
Для исследуемой структуры, приведенной на рисунке 2.1, приведены результаты расчетов по основным экситонным состояниям и энергиям связи экситонов, результаты которых сведены в таблицы 2.1, 2.2. Энергии переходов, соответствующих экситонной рекомбинации в квантовых ямах (Рис. 2.2), возрастают по мере увеличения числа введенных барьеров, тем самым отражая обусловленный введением барьеров сдвиг нижних подзон электронов и дырок в сторону больших энергий. Результаты расчетов по энергиям стационарного состояния экситона и энергии связи экситона в исследуемых квантовых ямах приведены в Таблицах 2.2 и 2.3. Можно отметить главное, что обнаружена немонотонная зависимость энергии связи экситонов от доли заполнения барьерами объема квантовой ямы. Поначалу энергия связи возрастает, а по мере увеличения числа барьеров начинает падать. Важно отметить, что квантовые ямы GaAs имеют одинаковую геометрию, в которых равномерно распределены барьеры  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ . Кроме того, на поведение энергии связи экситона существенное влияние оказывает различие диэлектрических проницаемостей материалов ям GaAs и барьеров  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ .

**Таблица 2.1** Рассчитанные значения основных экситонных состояний в квантовых ямах для исследуемой структуры.

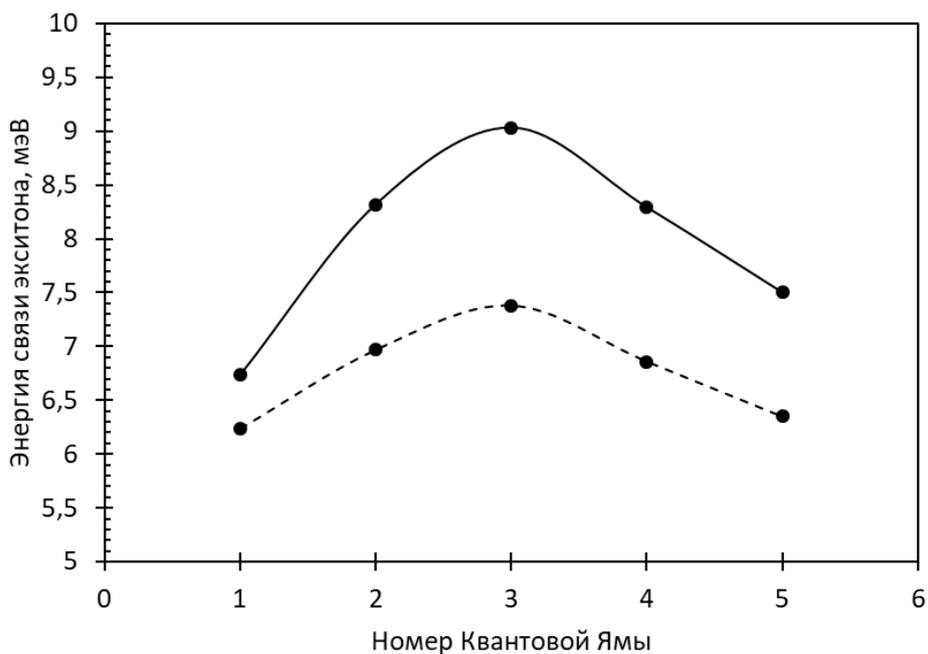
№ КЯ	Энергия экситона с учетом различия диэлектрических проницаемостей ям и барьеров, мэВ	Энергия экситона без учета различия диэлектрических проницаемостей ям и барьеров, мэВ
1	2,5	1,9
2	62,3	60,3
3	142,14	140,4
4	213,36	211,96
5	264,62	263,59

**Таблица 2.2** Рассчитанные значения энергии связи экситонов в квантовых ямах для исследуемой структуры.

№ КЯ	Энергия связи экситонов с учетом различия диэлектрических проницаемостей ям и барьеров, мэВ	Энергия связи экситонов без учета различия диэлектрических проницаемостей ям и барьеров, мэВ
1	6,74	6,24
2	8,32	6,97
3	9,03	7,38
4	8,29	6,86
5	7,5	6,35



**Рисунок 2.3** Рассчитанные энергии связи экситонов в квантовых ямах от доли заполнения барьерами объёма квантовой ямы. Сплошная линия, расчет с учетом различия диэлектрических проницаемостей ям и барьеров, пунктирная – без учета различия диэлектрических проницаемостей ям и барьеров.

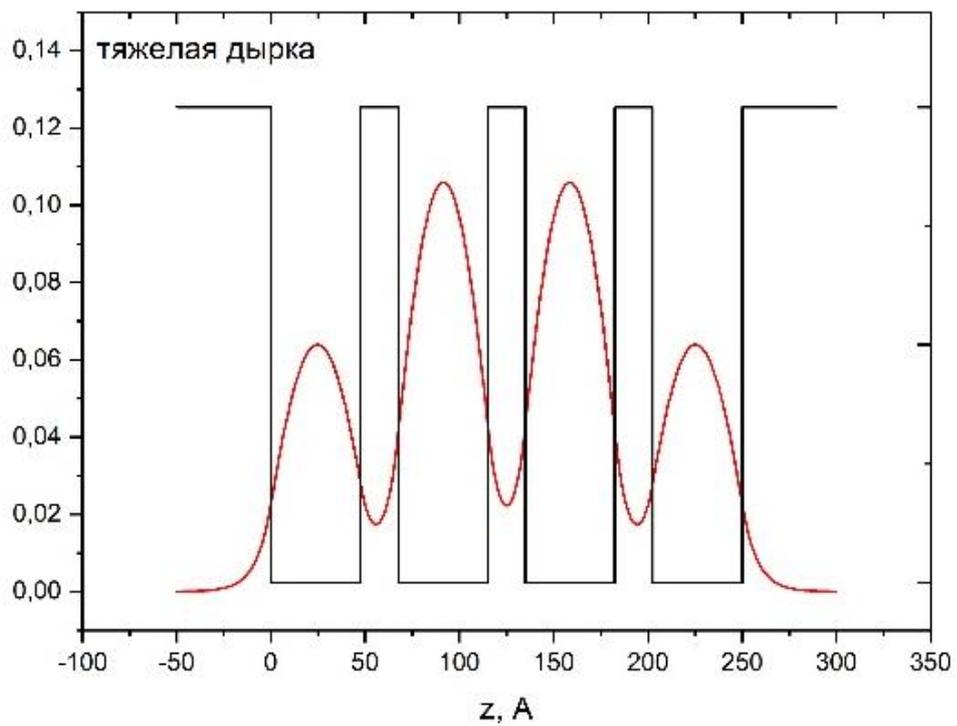
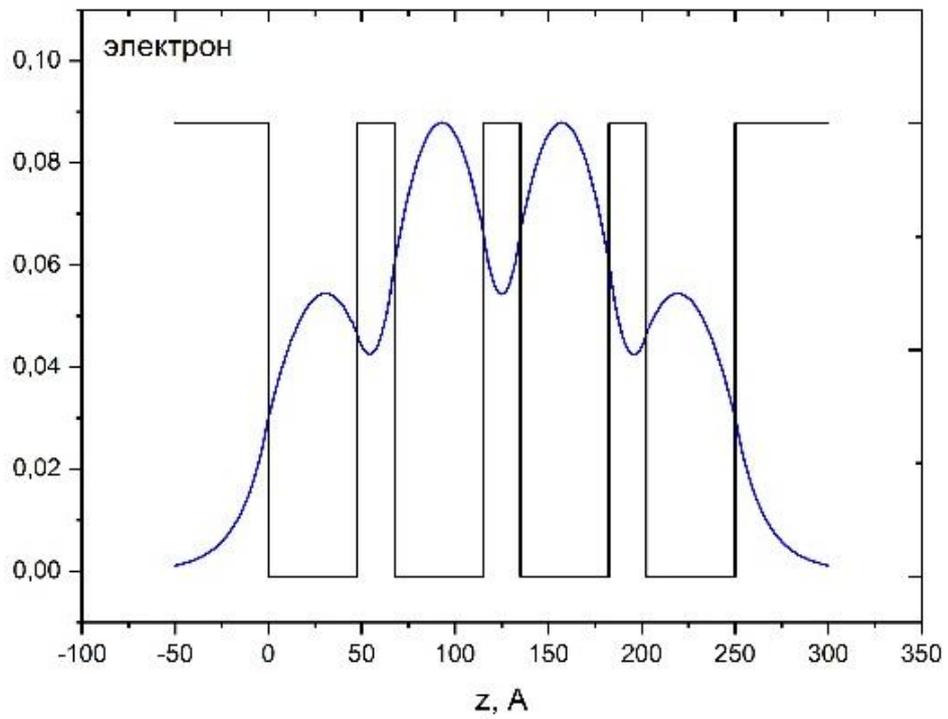


**Рисунок 2.4** Рассчитанные энергии связи экситонов в квантовых ямах соответственно номеру квантовой яме, приведенной на рисунке 2.1. Сплошная линия, расчет с учетом различия диэлектрических проницаемостей ям и барьеров, пунктирная – без учета различия диэлектрических проницаемостей ям и барьеров.

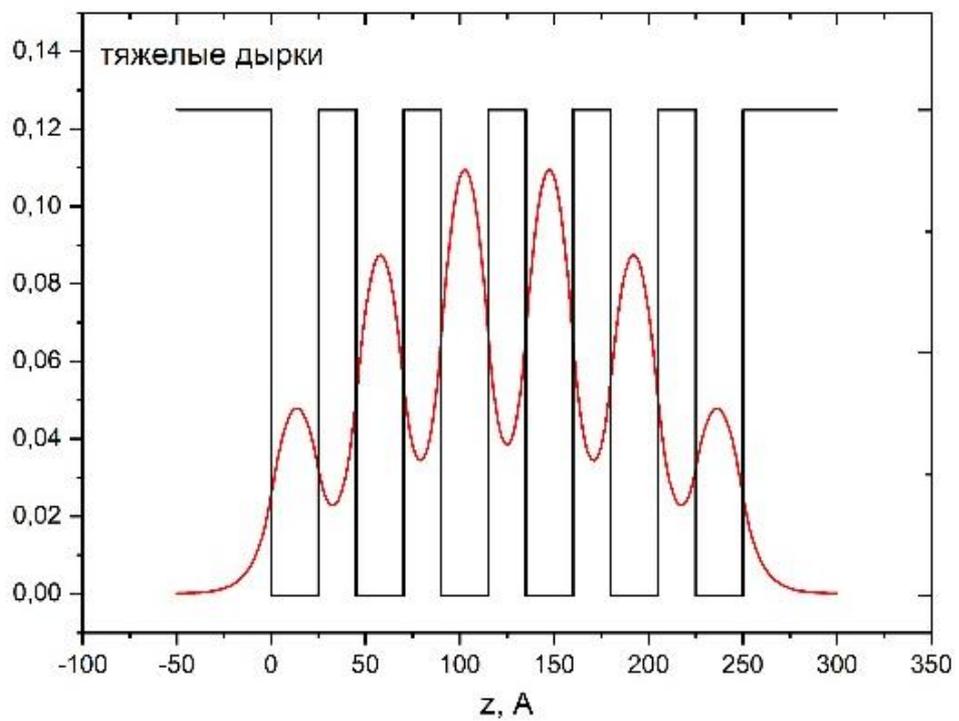
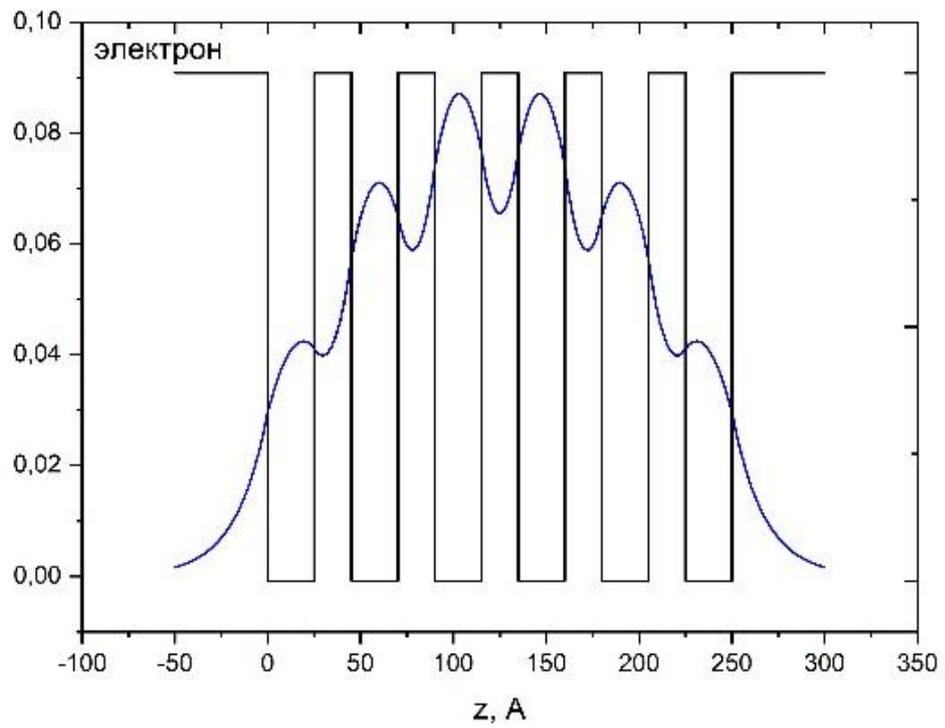
Такое поведение энергии связи экситона можно объяснить следующим образом. При достаточно малом числе барьеров (3 барьера на Рис.2.5) в распределении волновой функции возникает модуляция – волновая функция «вытесняется» из барьеров и локализуется в промежутках между ними, причем для дырок этот эффект сильнее, чем для электронов (см. Рис 2.5б). Тем самым усиливается степень локализации волновой функции, что приводит к усилению кулоновского взаимодействия электрона и дырки и, соответственно, к увеличению энергии связи экситона, подобно тому, как это происходит в квантовой яме по сравнению с объемом.

С увеличением числа введенных барьеров этот эффект поначалу возрастает (см. Рис.2.6 для 5 барьеров), а затем глубина модуляции волновой функции падает, и ее контур приближается к волновой функции более мелкой ямы (Рис.2.7 для 8 барьеров и Рис.2.8). Иными словами, происходит обратная делокализация волновой функции, что и приводит к ослаблению кулоновского взаимодействия и падению энергии связи экситона.

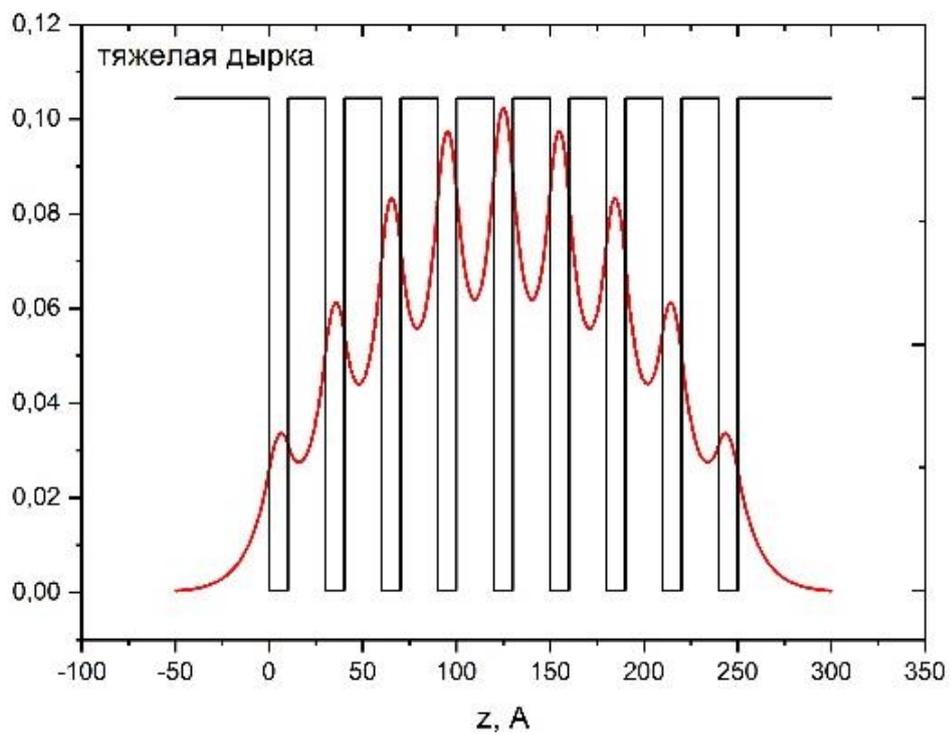
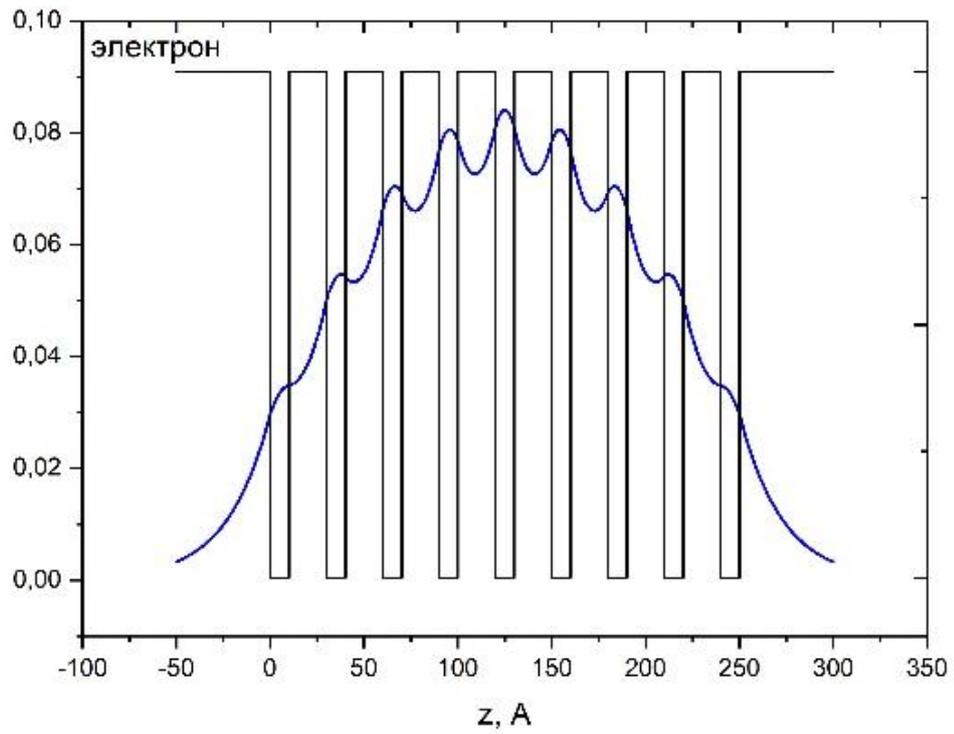
В качестве подтверждения рассуждений выше, рассмотрим рисунок 2.9, где приведена рассчитанная зависимость энергии связи экситона в одиночной квантовой яме GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As от глубины квантовой ямы. При уменьшении глубины ямы, т.е. приближении нижних подзон электронов и дырок к непрерывному спектру, энергия связи экситона падает. Тогда можно ожидать, что аналогичная тенденция должна иметь место и для квантовой ямы с барьерами.



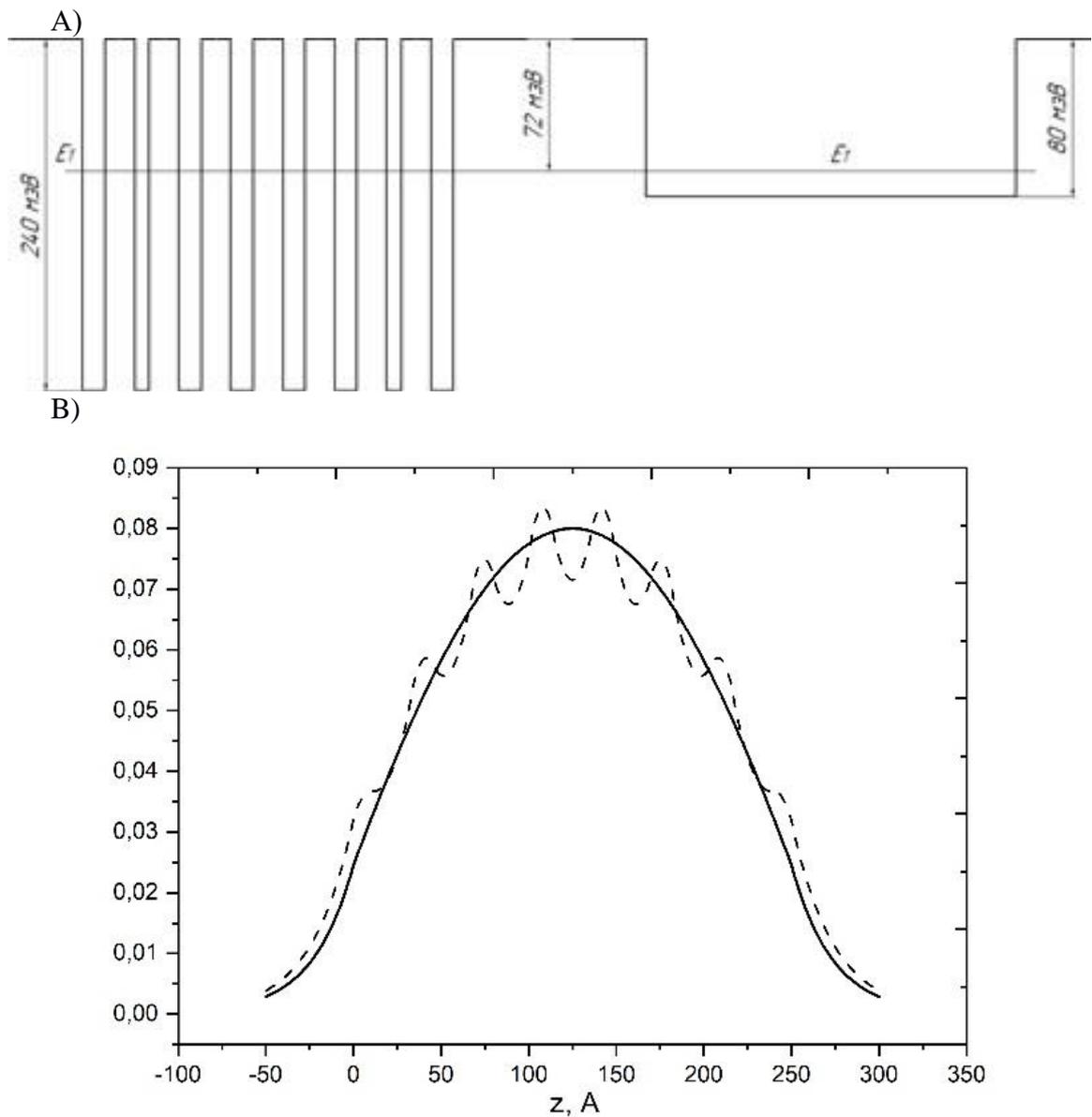
**Рисунок 2.5** Распределение волновой функции основного состояния электронов (а) и дырок (b) для квантовой ямы GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As с 3-мя введенными барьерами.



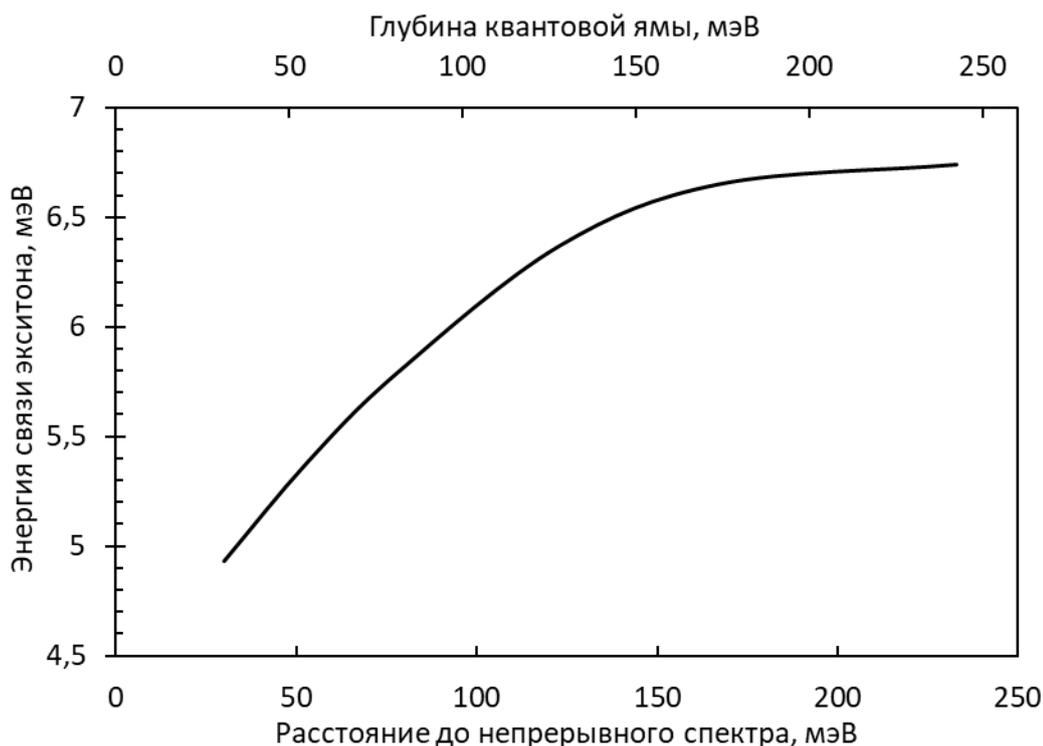
**Рисунок 2.6** Распределение волновой функции основного состояния электронов (а) и дырок (b) для квантовой ямы GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As с 5-ю введенными барьерами.



**Рисунок 2.7** Распределение волновой функции основного состояния электронов (а) и дырок (b) для квантовой ямы GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As с 8-ю введенными барьерами.



**Рисунок 2.8** Профили потенциалов (А) и волновые функции основного состояния электронов (Б) квантовых ям GaAs/Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>As с введенной серией барьеров и соответствующей квантовой ямы без барьеров меньшей глубины. Глубина ямы (80 мэВ) была выбрана таким образом, чтобы расстояние от нижнего уровня размерного квантования до непрерывного спектра (74 мэВ) в ней было тем же самым, что и в яме с барьерами.



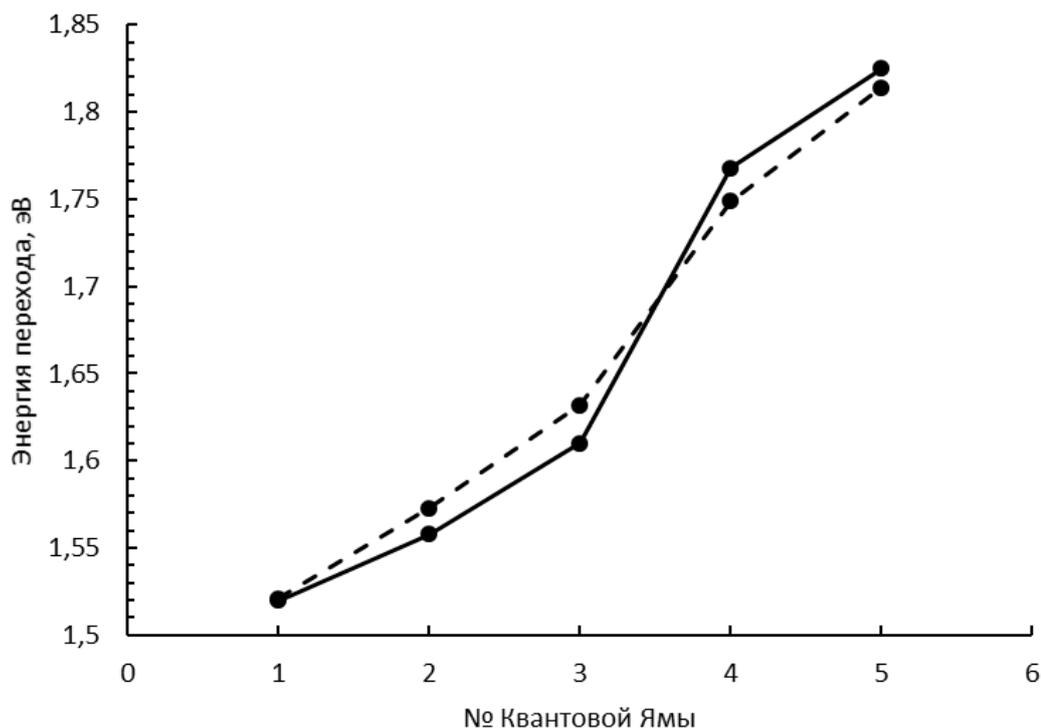
**Рисунок 2.9** Зависимость энергии связи экситона от глубины квантовой ямы.

Дополнительным фактором, приводящим к росту энергии связи экситона при увеличении доли заполнения барьерами объёма квантовой ямы, является уменьшение средней диэлектрической проницаемости квантовой ямы и, соответственно, усиление кулоновского взаимодействия, но его роль представляется второстепенной, поскольку уменьшение  $\epsilon$  происходит в барьерах, т.е. в минимумах волновых функций.

Далее проведем сравнение экспериментальных и расчетных значений энергий экситонных переходов, которые приведены в Таблице 2.3 на Рисунке 2.10.

**Таблица 2.3** Измеренные и рассчитанные энергии экситонных переходов в исследованных структурах.

№ КЯ	Эксперимент, мэВ	Расчет, мэВ
1	1520	1521
2	1558	1577
3	1602	1642
4	1768	1752
5	1825	1798



**Рисунок 2.10** Сравнение экспериментальных и рассчитанных значений энергий экситонных переходов для исследуемых квантовых ям. Сплошная линия соответствует экспериментальным значениям, пунктирная – расчётным с учетом энергии связи экситонов.

В данном случае получаем достаточно неплохое согласие рассчитанных значений энергий переходов с учётом энергии связи экситонов и экспериментально полученных величин в выращенной структуре GaAs/Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>As со встроенной серией тонких барьеров. Однако в реальных структурах могут проявляться несовершенства, которые связаны с качеством самой структуры и сложной конфигурацией введённых барьеров в квантовые ямы. Тем самым данное объяснение расхождения экспериментальных и рассчитанных значений энергий экситонных переходов может быть неполным, и не включает учета размытия гетерограниц и состава. Основная тенденция в неравномерности расположения пиков на спектрах ФЛ может быть объяснена немонотонной зависимостью энергии связи от доли, занимаемой барьерами в квантовой яме.

## 2.5 Выводы по разделу

В настоящей работе проведено численное исследование энергии связи экситона в квантовых ямах, содержащих серию тонких туннельно-прозрачных барьеров. Расчеты выполнены путем решения двухчастичной задачи на основе уравнения Шрёдингера для огибающей функции в параболическом приближении. В ходе исследования получены

зависимости энергии связи экситона от числа введенных барьеров, а также от их геометрической конфигурации внутри квантовой ямы. Анализ этих зависимостей показал, что энергия связи экситонов изменяется немонотонным образом в зависимости от степени заполнения объема квантовой ямы барьерами: на начальном этапе наблюдается рост энергии связи экситона, за которым следует её уменьшение.

Обнаруженные особенности были интерпретированы в терминах изменения пространственной локализации волновых функций электрона и дырки. При введении барьеров их локализации возрастает благодаря усилению кулоновского взаимодействия, что обусловлено «выталкиванием» волновых функций из областей барьеров в свободные зоны квантовой ямы. Такой эффект приводит к увеличению энергии связывания экситона на первых стадиях изменения конфигурации барьерной структуры. Однако с увеличением числа барьеров и роста степени их пространственного заполнения уменьшение объема свободной квантовой ямы становится доминирующим фактором. Волновые функции электрона и дырки переходят в состояние, приближенное к состоянию отдельных частиц в тонких квантовых ямах, что сопровождается уменьшением кулоновского взаимодействия и, как следствие, снижением энергии связи экситона.

Рассчитанные спектры экситонов были сопоставлены с экспериментальными данными, полученными в структурах GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As, содержащих встроенные тонкие туннельно-прозрачные барьеры. Анализ спектров фотолюминесценции, в которых зарегистрированы энергии экситонных переходов, продемонстрировал высокую степень согласия между теоретическими предсказаниями и экспериментальными измерениями, что подтвердило адекватность предложенной модели. Поначалу наблюдаемый рост энергии связывания экситона в эксперименте был связан именно с указанным выше эффектом локализации, в то время как последующее снижение энергий экситонных переходов согласуется с ослаблением кулоновского взаимодействия при увеличении заполнения квантовой ямы барьерами. Таким образом, результаты данной работы показывают, что введение тонких туннельно-прозрачных барьеров в структуру квантовых ям позволяет целенаправленно управлять энергией связи экситонов. Это открывает новые перспективы для проектирования оптоэлектронных устройств, использующих эффекты наложения и компенсации экситонных состояний.

## Приложение 2.1

Гамильтониан для квантовой ямы:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{2D} &= \frac{\hat{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\hat{p}_h^2}{2m_h} + U_e(z_e) + U_h(z_h) - \frac{\mathbf{r} e^2 \mathbf{r}}{\varepsilon |r_e - r_h|} = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_e - \frac{\hbar^2}{2m_h} \Delta_h + U_e(z_e) + U_h(z_h) - \frac{\mathbf{r} e^2 \mathbf{r}}{\varepsilon |r_e - r_h|},\end{aligned}\quad (2.1.1)$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_{2D} &= -\frac{\hbar^2}{2m_e^{xy}} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_e^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_e^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_h^{xy}} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_h^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_h^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_e^z} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_h^z} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + \\ &+ U_e(z_e) + U_h(z_h) - \frac{\mathbf{r} e^2 \mathbf{r}}{\varepsilon |r_e - r_h|},\end{aligned}\quad (2.1.2)$$

Кулоновский потенциал e-h пары

$$\begin{aligned}\frac{-e^2}{\varepsilon |r_e - r_h|} &= \frac{-e^2}{\varepsilon \sqrt{(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2 + (z_e - z_h)^2}} = \\ &= \frac{-e^2}{\varepsilon \sqrt{\rho_x^2 + \rho_y^2 + (z_e - z_h)^2}},\end{aligned}\quad (2.1.3)$$

Рассмотрим вектора относительного движения в плоскости (x, y)

$$\rho_x^2 + \rho_y^2 = (x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2, \quad (2.1.4)$$

$$\frac{1}{\mu_{eh}^{xy}} = \frac{1}{m_e^{xy}} + \frac{1}{m_h^{xy}}, \quad (2.1.5)$$

Преобразование в цилиндрическую систему координат в плоскости (x, y)

$$X = \frac{m_e x_e + m_h^{xy} x_h}{m_e + m_h^{xy}}, \quad Y = \frac{m_e y_e + m_h^{xy} y_h}{m_e + m_h^{xy}}, \quad (2.1.6)$$

$$\rho_x = x_e - x_h = \rho \cdot \cos \varphi, \quad (2.1.8)$$

$$\rho_y = y_e - y_h = \rho \cdot \sin \varphi,$$

Получаем

$$\hat{H}_{tot} = \hat{H}_K + \hat{H}_\rho + \hat{H}_e^0 + \hat{H}_h^0 + V_{e-h}, \quad (2.1.9)$$

$$H_e^0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e^z} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + U_e(z_e), \quad H_h^0 = -\frac{\hbar^2}{2m_h^z} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + U_h(z_h), \quad (2.1.10)$$

$$\hat{H}_\rho = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{eh}^{xy}} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right), \quad (2.1.11)$$

$$\hat{H}_K = \frac{\hbar^2 (K_x^2 + K_y^2)}{2(m_e + m_h^{xy})}, \quad (2.1.12)$$

$$V_{e-h} = -\frac{e^2}{\varepsilon \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}}, \quad (2.1.13)$$

$$\hat{H}_{tot} = \frac{\hbar^2(K_x^2 + K_y^2)}{2(m_e + m_h^{xy})} - \frac{\hbar^2}{2\mu_{eh}} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_e^z} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_h^z} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + U_e(z_e) + U_h(z_h) - \frac{e^2}{\varepsilon \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}}, \quad (2.1.14)$$

Соответствующая волновая функция имеет вид:

$$\Psi(X, Y, z_e, z_h, \rho, \varphi) = e^{iK_x X} e^{iK_y Y} e^{ik_\varphi \varphi} \frac{\Psi(z_e, z_h, \rho)}{\rho}, \quad (2.1.15)$$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e^z} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_h^z} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu_{eh}} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1-k_\varphi^2}{\rho^2} \right) + U_e(z_e) + U_h(z_h) - \frac{e^2}{\varepsilon \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \right] \Psi(z_e, z_h, \rho) = E \Psi(z_e, z_h, \rho), \quad (2.1.16)$$

## Приложение 2.2

Гамильтониан в параболическом приближении эффективной массы

$$\hat{H}_{tot} = \hat{H}_e^{(0)} + \hat{H}_{hh}^{(0)} + \hat{H}_\rho + \hat{V}_{Cul}, \quad (2.2.1)$$

$$\hat{H}_e^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2m_e^z} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + U_e(z_e), \quad (2.2.2)$$

$$\hat{H}_{hh}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2m_h^z} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + U_h(z_h) \quad (2.2.3)$$

$$\hat{H}_\rho = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{eh}^{xy}} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \right) \quad (2.2.4)$$

$$\hat{V}_{Cul} = -\frac{e^2}{\varepsilon \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \quad (2.2.5)$$

Полный Гамильтониан:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{tot} = & -\frac{\hbar^2}{2m_e^z} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_h^z} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu_{eh}^{xy}} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \right) + \\ & + U_e(z_e) + U_h(z_h) - \frac{e^2}{\varepsilon \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}}, \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

Для дискретизации мы используем конечно-разностную аппроксимацию второго порядка [42] частных производных в уравнении (2.1.6) на эквидистантных сетках по трем переменным. Воспользуемся формулой второго порядка для аппроксимации членов второй частной производной по  $z$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2\Delta_z^2} \left( \frac{2}{m_{i-1} + m_i} \chi(z_{i-1}) - \left[ \frac{2}{m_{i-1} + m_i} + \frac{2}{m_i + m_{i+1}} \right] \chi(z_i) + \frac{2}{m_i + m_{i+1}} \chi(z_{i+1}) \right), \quad (2.2.7)$$

Шаги сетки по каждой переменной приняты одинаковыми  $\Delta = \Delta_{z_e} = \Delta_{z_h} = \Delta_\rho$ . уравнение (2.1.7) определяет теоретическую неопределенность численного решения второго порядка  $\Delta^2$  как  $\Delta \rightarrow 0$ . Аналогичным образом рассматриваются разрывы прямоугольного потенциала ямы.

Численный метод расчета:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z_e^2} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial z_h^2} = \frac{\psi_{i-1,j,k} - 2\psi_{i,j,k} + \psi_{i+1,j,k}}{\Delta z^2} = \frac{\psi_{i,j-1,k} - 2\psi_{i,j,k} + \psi_{i,j+1,k}}{\Delta z^2}, \quad (2.2.8)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \rho^2} = \frac{\psi_{i,j,k-1} - 2\psi_{i,j,k} + \psi_{i,j,k+1}}{\Delta \rho^2}, \quad (2.2.9)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \rho} = \frac{\psi_{i,j,k-1} - \psi_{i,j,k+1}}{2\Delta \rho}, \quad (2.2.10)$$

Поскольку частицы в связанном состоянии локализованы в основном внутри ямы и близко друг к другу ( $z, \rho \rightarrow 0$ ), волновая функция обращается в нуль вдали от ширины ямы  $z \gg Z$  и на больших расстояниях между частицами  $\rho \gg 1$ , поэтому можно принять нулевые граничные условия. Для точности 2-го порядка:

$$\frac{\partial}{\partial \rho} f(\rho_k) = \frac{f(\rho_{k+1}) - f(\rho_{k-1})}{2\Delta\rho}, \quad (2.2.11)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} f(\rho_k) = \frac{f(\rho_{k-1}) - 2f(\rho_k) + f(\rho_{k+1})}{(\Delta\rho)^2}, \quad (2.2.12)$$

и то же по оси  $z$ , принимая нулевые значения в точках сетки вне расчетной области  $1 \leq n \leq N_z, 1 \leq k \leq N_\rho$ .

Для точности 4-го порядка в направлении  $z$  мы снова используем центральные разности с тем же предположением о нулевых значениях вне области:

$$\frac{\partial}{\partial z} f(z_n) = \frac{f(z_{n-2}) - 8f(z_{n-1}) + 8f(z_{n+1}) + f(z_{n+2})}{12\Delta z}, \quad (2.2.13)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} f(z_n) = \frac{-f(z_{n-2}) + 16f(z_{n-1}) - 30f(z_n) + 16f(z_{n+1}) - f(z_{n+2})}{12(\Delta z)^2}, \quad (2.2.14)$$

Однако для направления  $\rho$  нам необходимо явно учесть невозможность отрицательного расстояния  $\rho$  и, следовательно, использовать версию формулы (2.2.7) с соответствующим смещением индексов:

$$\frac{\partial}{\partial \rho} f(\rho_k) = \frac{-3f(\rho_{k-1}) - 10f(\rho_k) + 18f(\rho_{k+1}) - 6f(\rho_{k+2}) + f(\rho_{k+3})}{12\Delta\rho}, \quad (2.2.15)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} f(\rho_k) = \frac{10f(\rho_{k-1}) - 15f(\rho_k) - 4f(\rho_{k+1}) + 14f(\rho_{k+2}) - 6f(\rho_{k+3}) + f(\rho_{k+4})}{12(\Delta\rho)^2}, \quad (2.2.16)$$

Алгоритм Арнольди выбран для эффективного поиска крайних собственных значений крупных разреженных матриц, характерных для квантово-механических задач. Метод основан на построении ортонормированного базиса Крылова, что позволяет аппроксимировать спектр матрицы без её полной диагонализации. Для системы с  $N$  узлами сетки алгоритм имеет сложность  $O(Nk)$ , где  $k$  — число итераций, что существенно экономит вычислительные ресурсы. В результате мы вычислили наименьшее собственное значение матрицы и соответствующий собственный вектор. После экстраполяции к пределу  $\Delta = 0$  получаются точные асимптотические результаты. Таким образом, мы нашли энергию  $E_x(\Delta m, \Delta \varepsilon)$  для КЯ с различной конфигурацией введённых барьеров.

### Приложение 2.3

Вывод выражения для энергии связи экситона в квантовой яме GaAs/AlGaAs методом конечных разностей 2-го порядка

1. Полное уравнение Шрёдингера для экситона:

Гамильтониан экситона в квантовой яме учитывает:

- Кинетическую энергию электрона и дырки с переменными эффективными массами.
- Потенциал квантовой ямы  $V_e(z_e)$  и  $V_h(z_h)$ .
- Кулоновское взаимодействие с учётом локальных диэлектрических проницаемостей.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla_e \left( \frac{1}{m_e(z_e)} \nabla_e \right) - \frac{\hbar^2}{2} \nabla_h \left( \frac{1}{m_h(z_h)} \nabla_h \right) + V_e(z_e) + V_h(z_h) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r(z_e, z_h, \rho)} \cdot \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}}, \quad (2.3.1)$$

Где  $\rho = \sqrt{(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2}$  – расстояние между электроном и дыркой в плоскости ямы.  $\epsilon_r(z_e, z_h, \rho)$  – локальная диэлектрическая проницаемость (зависит от положения электрона и дырки).

Дискретизация методом конечных разностей

- По координате электрона  $z_e$ :  $z_e^{(i)} = i\Delta z_e$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots, N_e$ .
- По координате дырки  $z_h$ :  $z_h^{(j)} = j\Delta z_h$ ,  $j = 0, 1, 2, \dots, N_h$ .
- По радиальной координате  $\rho$ :  $\rho^{(k)} = k\Delta\rho$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots, N_\rho$ .

Кинетическая энергия (пример для  $z_e$  - направления):

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz_e} \left( \frac{1}{m_e(z_e)} \frac{d\psi}{dz_e} \right) \approx -\frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{1}{m_e^{(i+1/2)}} \cdot \frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{(\Delta z_e)^2} - \frac{1}{m_e^{(i-1/2)}} \cdot \frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{(\Delta z_e)^2} \right], \quad (2.3.2)$$

Где  $m_e^{(i\pm 1/2)} = (m_e^{(i)} + m_e^{(i\pm 1)})/2$  - среднее значение массы на границе ячейки.

Кулоновский член:

$$V_C^{(i,j,k)} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{\epsilon_r^{(i,j,k)} \sqrt{(\rho^{(k)})^2 + (z_e^{(i)} - z_h^{(j)})^2}}, \quad (2.3.3)$$

Где  $\epsilon_r^{(i,j,k)} = \epsilon_{well}$  внутри ямы и  $\epsilon_{barrier}$  в барьерах.

Уравнения для заполнения трехмерной матрицы коэффициентов

Волновая функция  $\psi(z_e, z_h, \rho)$  дискретизируется как  $\psi_{i,j,k}$ . Уравнение  $\hat{H}\psi = E\psi$  преобразуется в систему линейных уравнений:

$$\sum_{i',j',k'} A_{i,j,k}^{i',j',k'} \psi_{i',j',k'} = E \psi_{i,j,k}, \quad (2.3.4)$$

$$A_{i,j,k}^{i+1,j,k} = -\frac{\hbar^2}{2(\Delta z_e)^2} \frac{1}{m_e^{(i+1/2)}}, \quad A_{i,j,k}^{i-1,j,k} = -\frac{\hbar^2}{2(\Delta z_e)^2} \frac{1}{m_e^{(i-1/2)}}, \quad (2.3.5)$$

$$A_{i,j,k}^{i,j,k} = \frac{\hbar^2}{2(\Delta z_e)^2} \left( \frac{1}{m_e^{(i+1/2)}} + \frac{1}{m_e^{(i-1/2)}} \right), \quad (2.3.6)$$

Аналогично для  $z_h$  с заменой  $m_e \rightarrow m_h$ .

Учет потенциала ямы:

$$A_{i,j,k}^{i,j,k} = V_e(z_e^{(i)}) + V_h(z_h^{(j)}), \quad (2.3.7)$$

Учет Кулоновского члена:

$$A_{i,j,k}^{i,j,k} = V_C^{(i,j,k)}, \quad (2.3.8)$$

Радиальная часть ( $\rho$ -направление):

$$\frac{1}{\rho} \frac{d\psi}{d\rho} \approx \frac{1}{2\rho^{(k)}\Delta\rho} (\psi_{i,j,k+1} - \psi_{i,j,k-1}), \quad (2.3.9)$$

$$\frac{d^2\psi}{d\rho^2} \approx \frac{\psi_{i,j,k+1} - 2\psi_{i,j,k} + \psi_{i,j,k-1}}{(\Delta\rho)^2}, \quad (2.3.10)$$

Граничные условия

- При  $z_e = -L_z/2$  и  $z_e = +L_z/2$ :  $\psi=0$ .
- При  $\rho=0$ :  $\psi_{i,j,k=0}$  конечно,  $\psi_{i,j,k=1} = \psi_{i,j,k=-1}$  (симметрия).
- При  $\rho = \rho_{max} = 4L_z$ :  $\psi=0$  (локализация).

Эффективные массы  $m_{e,h}(z_{e,h})$  принимают значения:

$$m_{e,h}(z_{e,h}) = \begin{cases} m_{e,h}^{well}, & z_{e,h} \in \text{яме} \\ m_{e,h}^{barrier}, & z_{e,h} \in \text{барьеру} \end{cases}, \quad (2.3.11)$$

Далее матрица  $A$  размером  $(N_z \times N_z \times N_\rho)^2$  решается методом Арнольди для нахождения минимального собственного значения  $E$ . Точный вид матрицы  $A$  и её заполнение зависят от деталей сетки и параметров материалов. Энергия связи экситона определяется как  $E_b = E_{exc} - E_e - E_h$ , где  $E_{e,h}$  — энергии основных подзон для одночастичных задач, для электрона и дырки.

## Приложение 2.4

Рассмотрим результаты расчета для экситонной задачи на примере пустой квантовой ямы шириной 25 нм и квантовой ямы с 8-ю введёнными барьерами с использованием сетки размером  $128 \times 128 \times 128$  и установим максимальные значения  $Z_{\max} = R_{\max} = 40$  для определения основного уровня энергии экситона в пустой квантовой яме.

Учитывая, что пространственная дискретизация вносит систематическую ошибку, зависящую от размеров шага сетки  $\Delta z$ ,  $\Delta \rho$ , моделирование повторяется несколько раз для различных размеров сетки. Затем вычисленные значения энергии экстраполируются к нулевым шагам  $\Delta z \rightarrow 0$ ,  $\Delta \rho \rightarrow 0$  дающий реальный физический результат.

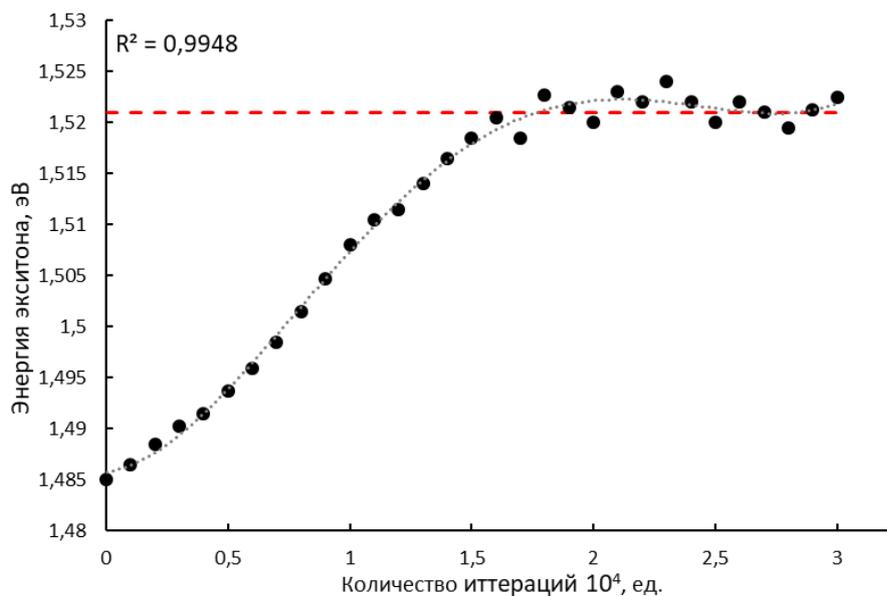
$$\psi' = \hat{H}\psi, \quad (2.4.1)$$

$$\|\psi'\| = \sqrt{\sum_N (\psi'_n)^2}, \quad (2.4.2)$$

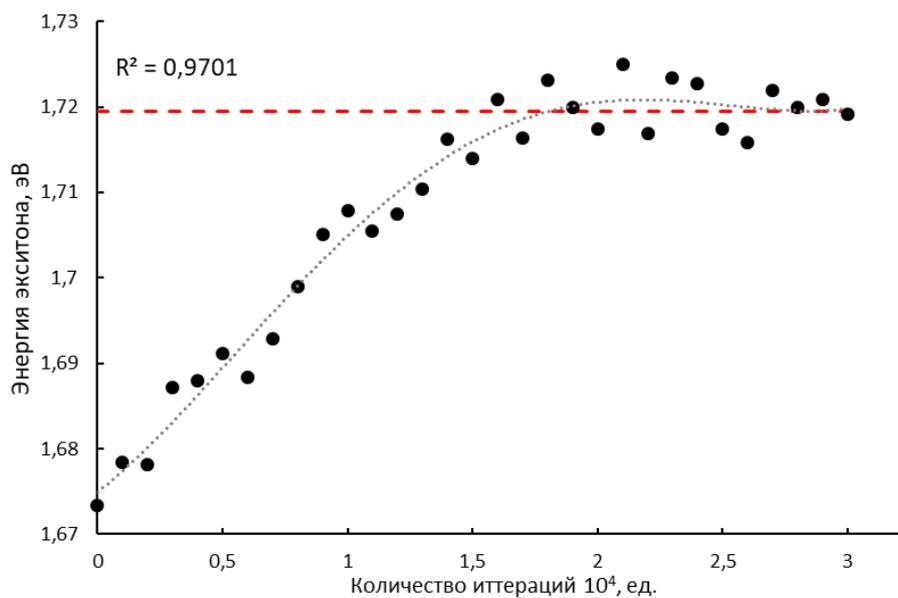
$$\psi^{(next)} = \frac{\psi'}{\|\psi'\|}, \quad (2.4.3)$$

$$\left(\hat{H} - E_{\max}\right)^n \psi_{trial} \rightarrow \left(E_{\min} - E_{\max}\right)^n \psi_0, \quad (2.4.4)$$

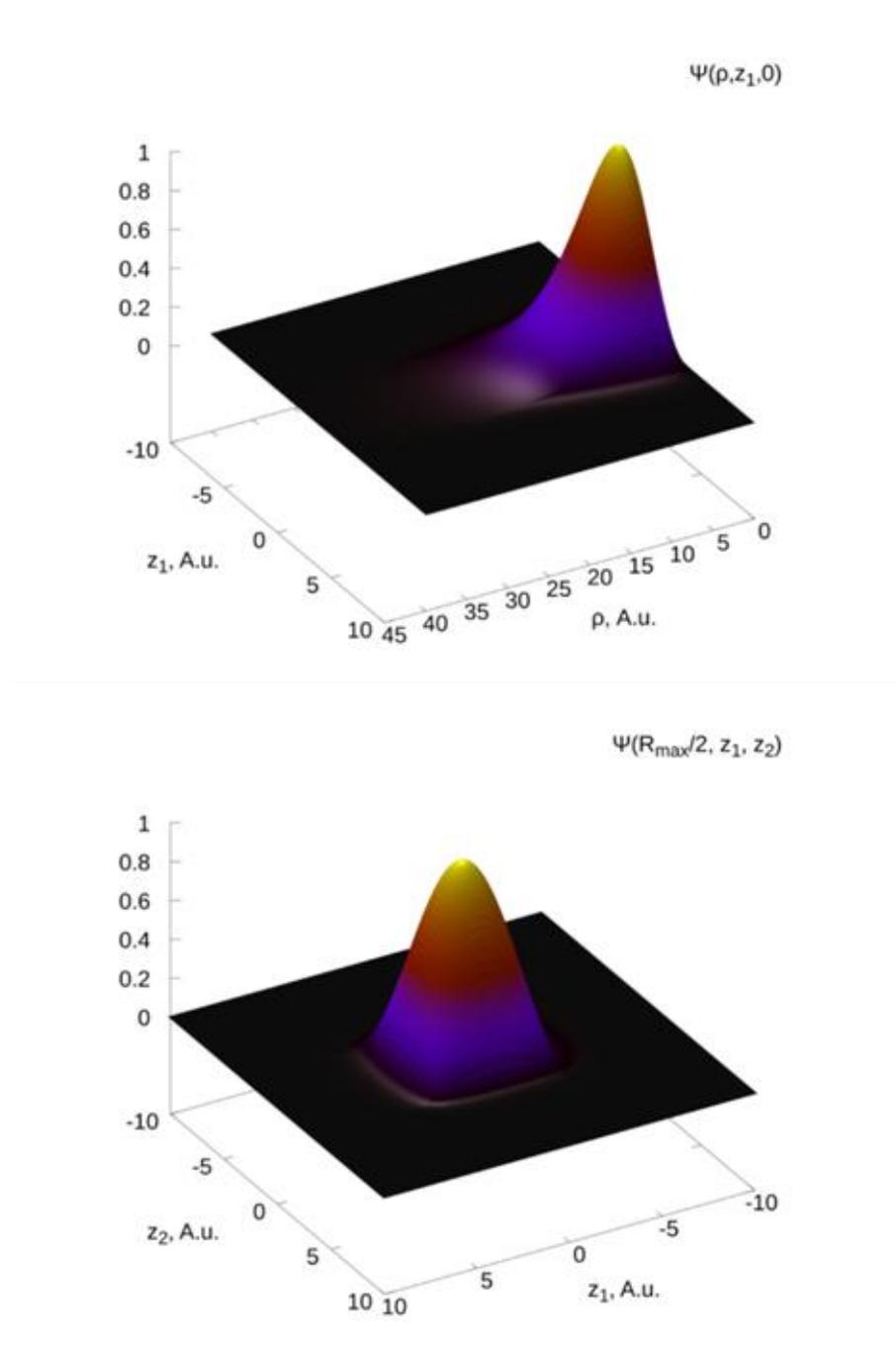
В данном случае, плотность частиц локализована внутри квантовой ямы ( $z_i \rightarrow 0$ ) и при малых значениях расстояния между частицами  $\rho \rightarrow 0$ , что подтверждает физическую обоснованность волновой функции. Результат теперь соответствует минимальному собственному значению.



**Рисунок 2.4.1** - Энергия экситона пустой квантовой яме в зависимости от количества шагов итерации расчетной сетки.

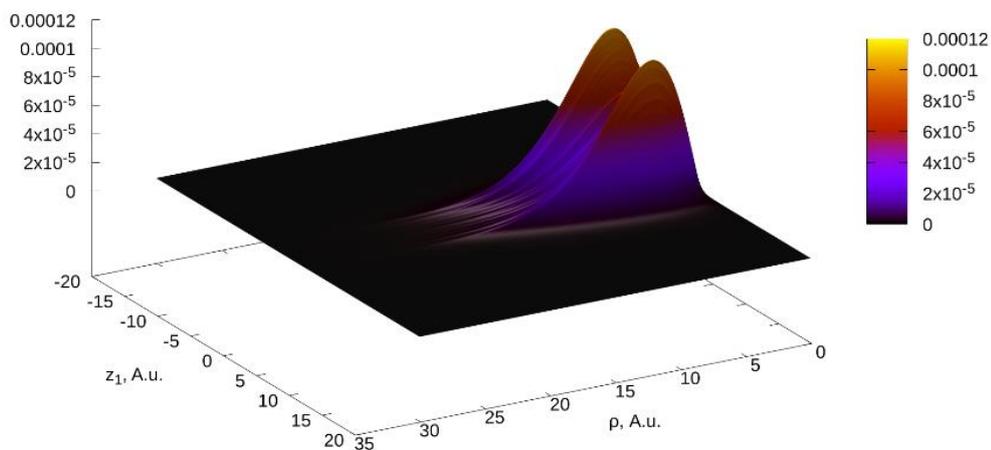


**Рисунок 2.4.2** - Энергия экситона в квантовой яме с 8-ю введёнными равномерно барьерами в зависимости от количества шагов итерации размерной сетки.

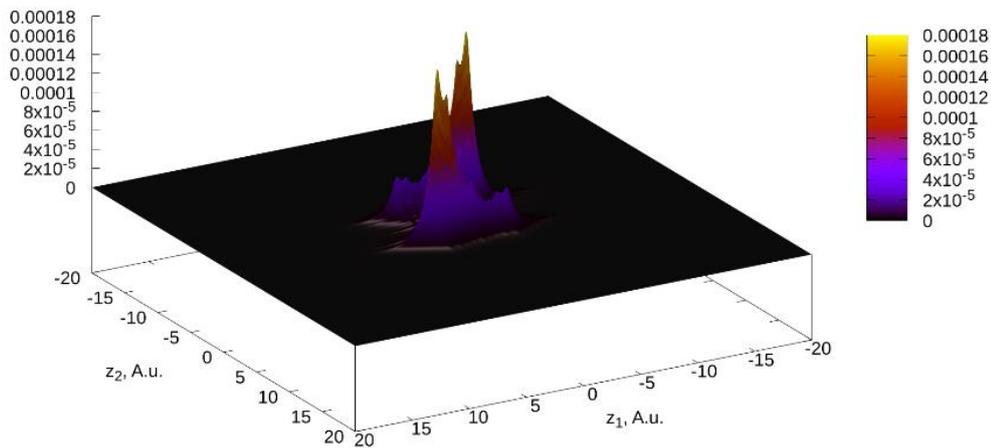


**Рисунок 2.4.3** - Волновая функция экситона, рассчитанная для квантовой ямы, показанной на рисунке 4.4.1: (а)  $z_2 = 0$ , (а)  $\rho = R_{\max}/2$ .

$L = 24.9 \text{ nm}$ ,  $E_0(e) = 0.180210 \text{ eV}$ ,  $E_0(h) = 0.086457 \text{ eV}$ ,  $E_0(exc) = 0.259416 \text{ eV}$ ,  $\Delta E = -0.007252 \text{ eV}$   
 $\Psi(\rho, z_1, 0)$



$L = 24.9 \text{ nm}$ ,  $E_0(e) = 0.180210 \text{ eV}$ ,  $E_0(h) = 0.086457 \text{ eV}$ ,  $E_0(exc) = 0.259416 \text{ eV}$ ,  $\Delta E = -0.007252 \text{ eV}$   
 $\Psi(R_{max}/2, z_1, z_2)$



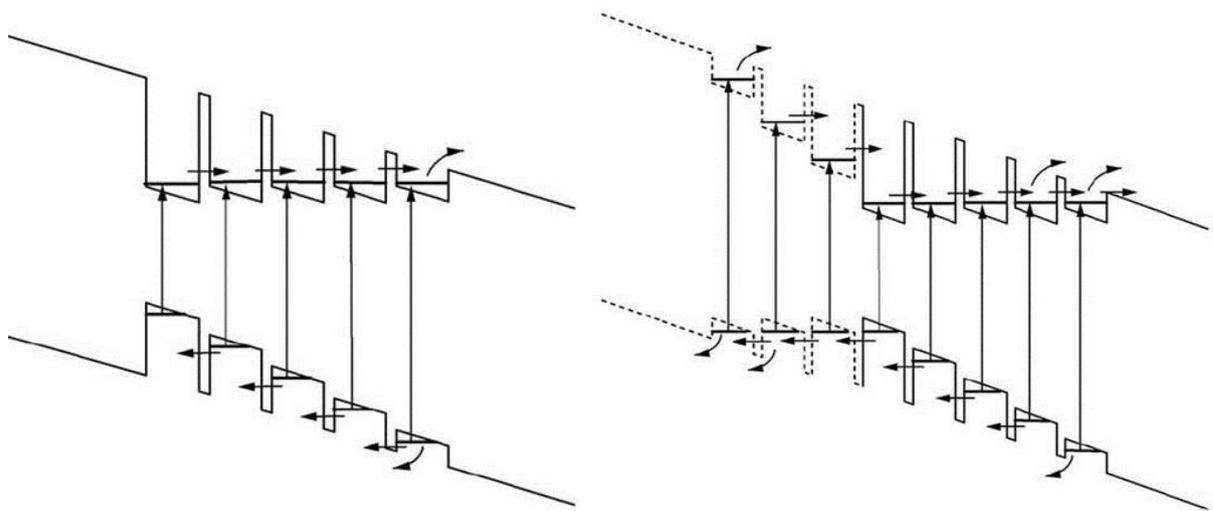
**Рисунок 2.4.4** - Волновая функция экситона, рассчитанная для квантовой ямы, показанной на рисунке 4.4.2: (а)  $z_2 = 0$ , (а)  $\rho = R_{max}/2$ .

## ГЛАВА 3. ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО И ДЫРОЧНОГО РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНЫХ КАНАЛОВ НА ФОТОПОВОДИМОСТЬ

### 3.1 Введение

Современные фотоэлектрические технологии, основанные на низкоразмерных гетероструктурах с квантовыми ямами, сталкиваются с фундаментальным вызовом — эффективным извлечением фотогенерированных носителей заряда из областей их генерации. Одним из перспективных механизмов преодоления этой проблемы является явление резонансного туннелирования, позволяющее реализовать направленный транспорт носителей через систему потенциальных барьеров. Однако как показали многочисленные исследования [32–45], основное внимание в данной области сосредоточено на электронной подсистеме, в то время как транспорт дырок остаётся малоизученным, что приводит к неполному пониманию физических процессов в таких структурах и ограничивает их эффективность.

В классических работах, посвящённых резонансно-туннельным гетероструктурам в *p-i-n* переходах [4,7], дырочная компонента рассматривается как пассивный элемент, не требующий отдельной оптимизации. В таких моделях предполагается, что дырки либо рекомбинируют с электронами, либо экстрагируются за счёт диффузионных процессов. Однако как продемонстрировано в данной главе, подобный подход приводит к критическим ограничениям. В структурах без резонансно-туннельного канала для дырок (рис. 3.1а) фотодырки, генерируемые в наиболее глубокой квантовой яме, накапливаются в ней из-за отсутствия эффективного механизма выхода. Это вызывает два ключевых негативных эффекта: Рост скорости рекомбинации — увеличение концентрации дырок  $p_0$  в зоне генерации усиливает скорость потерь  $R = Bnp$ , где  $B$  — коэффициент рекомбинации. Нарушение резонансных условий для электронов — нескомпенсированный положительный заряд дырок создаёт паразитное электрическое поле  $F_{\text{заряд}}$ , которое способно нарушать согласование электронных подзон. Это нарушение может превышать ширину резонанса  $\Gamma \sim 1$  мэВ и ухудшает условия туннелирования, снижая электронный ток. Указанные эффекты ставят под сомнение адекватность моделей, игнорирующих дырочный транспорт, и подчёркивают необходимость комплексного подхода. В данной главе предложена и исследована асимметричная резонансно-туннельная структура (рис. 3.1б), в которой реализованы отдельные каналы для электронов и дырок.



**Рисунок 3.1** Схема структуры квантовой ямы в электрическом поле р-і-п перехода, реализующего резонансно-туннельный транспортный канал, а) только для электронов; б) как для электронов, так и для дырок.

В рамках настоящей главы разработаны и предложены модельные структуры резонансно-туннельных гетероструктур, обеспечивающие синхронный вывод, как фотоэлектронов, так и фотодырок из глубоких квантовых ям в условиях электрического поля р-і-п перехода. Основой предложенного подхода является формирование последовательности квантовых ям с резонансно согласованными подзонами, достигаемого за счёт управления положениями подзон в квантовых ямах. Как показано в работах [4,5], введение тонких туннельно-прозрачных барьеров (толщиной 2–3 нм) позволяет контролировать положение основных электронных подзон, обеспечивая их выравнивание в электрическом поле. Это создаёт условия для последовательного резонансного туннелирования, при котором носители поэтапно преодолевают барьеры, туннелируя из области генерации (глубокая квантовая яма) в непрерывный спектр.

Анализ существующих исследований [5–8] выявил, что большинство работ фокусируется на электронном транспорте, в то время как дырочная компонента часто остаётся за рамками рассмотрения. Однако как продемонстрировано в данной главе, игнорирование дырочной подсистемы приводит к накоплению заряда в квантовых ямах, что провоцирует рост скорости рекомбинации и нарушение резонансных условий для электронов. Для преодоления этих ограничений предложена асимметричная архитектура структуры, в которой: Правая подсистема (каскад ям N5–N8) обеспечивает резонансный транспорт электронов за счёт согласования нижних подзон в электрическом поле р-і-п перехода. Левая подсистема (каскад ям N1–N3) реализует аналогичный механизм для дырок, предотвращая их накопление.

В рамках данной главы на основе исследуемого метода проведена разработка резонансно-туннельных последовательностей квантовых ям, интегрируемых в p-i-n переход. Основная идея метода заключается в создании каскада квантовых ям с управляемыми параметрами, обеспечивающего направленный транспорт электронов и дырок из глубоких потенциальных ям в непрерывный спектр за счёт резонансного туннелирования. Ключевым преимуществом предложенного метода является его функциональность: варьируя конфигурацию вводимых в квантовую яму барьеров, можно адаптировать структуру под конкретный фотоэлемент, оптимизируя как поглощение в целевой спектральной области, так и эффективность экстракции носителей.

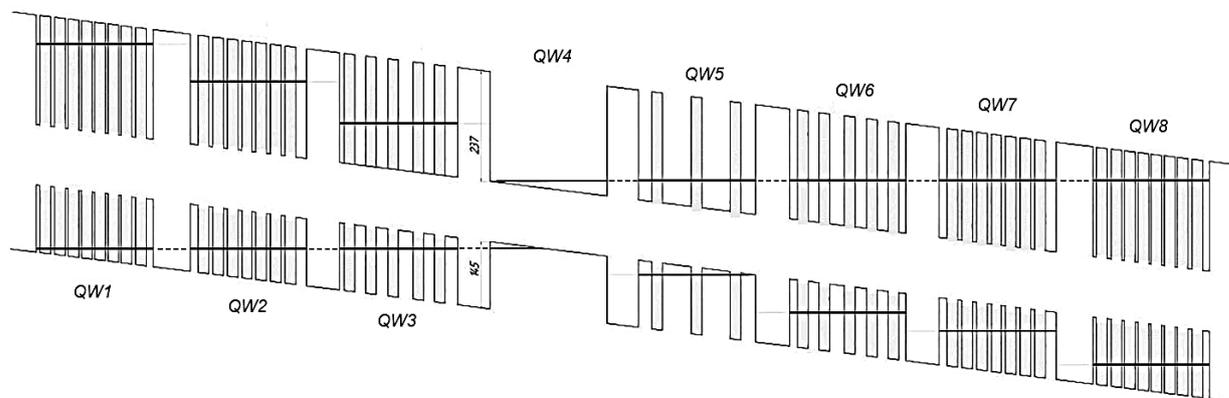
Для демонстрации подхода проведено модельное исследование на примере гетероструктуры  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ . Выбор данной системы обусловлен её широким применением в высокоэффективных солнечных элементах и лазерах, а также выраженной асимметрией в транспорте электронов и дырок. Важно подчеркнуть, что в данной работе основной акцент смещён с оценки общего КПД фотоэлемента на анализ эффективности извлечения носителей из квантовых ям. Такой подход обусловлен тем, что именно этот параметр определяет предельные возможности структуры по преобразованию света в ток, особенно в многопереходных системах, где каскадные ямы выполняют функцию спектрально-селективных поглотителей. Полученные результаты показывают, что предложенная резонансно-туннельная последовательность повышает эффективность экстракции более 83% для электронов и дырок, при характерных временах рекомбинации.

### 3.2 Дизайн резонансно-туннельных структур из квантовых ям

Предложенный дизайн резонансно-туннельной гетероструктуры (рис. 3.2) реализует синхронный транспорт фотоэлектронов и фотодырок через отдельные каскады квантовых ям (КЯ) в условиях электрического поля p-i-n перехода. Основой структуры служат последовательности КЯ GaAs с фиксированной шириной 25 нм, разделённых барьерами  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  толщиной 5 нм. Путём изменения конфигурации вводимых в квантовые ямы тонких туннельно-прозрачных барьеров происходит изменение положения основной подзоны в квантовых ямах с заданным шагом. Требуемое изменение необходимо для обеспечения резонансного согласования подзон в последовательности квантовых ям помещённых в p-i-n переход.

Напряженность электрического поля в i-слое ( $1.5 \cdot 10^4$  В/см) была рассчитана путем решения одномерного уравнения Пуассона [91] для следующих параметров p-i-n перехода: концентрация доноров и акцепторов  $1 \times 10^{17}$  см<sup>3</sup>, ширина i-слоя 1 мкм, температура 300 К. Ширина барьеров, отделяющих квантовые ямы друг от друга,

составляет 5 нм., поэтому падение напряжения между соседними квантовыми ямами составляет 45 мэВ. Рассчитанные энергии подзон для электронов и дырок в квантовых ямах с введённой серией туннельно-прозрачных барьеров приведены в таблице 3.1.



**Рисунок 3.2** Профиль структуры, включающей ряд квантовых ям со встроенными барьерами в электрическом поле р-і-п-перехода.

**Таблица 3.1** Расчетные энергии нижних подзон электронов и дырок для структуры, представленной на рис. 5 (выделены значения, обеспечивающие резонансное согласование в электрическом поле р-і-п перехода).

№ КЯ	Количество барьеров	$E_{hh}$ , меВ	$E_c$ , меВ
1	8	<b>89.45</b>	180.3
2	7	<b>63.2</b>	153.9
3	5	<b>42.6</b>	102.6
4	-	<b>1.39</b>	<b>6.81</b>
5	3	15.84	<b>53.82</b>
6	5	42.6	<b>102.6</b>
7	7	63.2	<b>153.9</b>
8	8	89.45	<b>183.1</b>

Предложенная резонансно-туннельная гетероструктура (рис. 3.2) обладает функциональной асимметрией, обеспечивающей разделение путей транспорта электронов и дырок. Правая часть структуры (ямы N5–N8) реализует резонансно-туннельный перенос электронов, фотовозбужденных в глубокой квантовой яме N4, в направлении п-области фотодиода. В свою очередь, левая часть (ямы N1–N3) организует направленный транспорт дырок из ямы N4 к р-контакту, предотвращая их накопление и подавляя рекомбинацию. Ключевым элементом конструкции является резонансное согласование подзон соседних квантовых ям, достигаемое за счёт управления положениями подзон в квантовых ямах путем введения серии тонких туннельно-прозрачных барьеров. Асимметричная

архитектура структуры с отдельными резонансно-туннельными каналами для электронов и дырок позволяет преодолеть фундаментальное ограничение традиционных фотопреобразователей — рекомбинационные потери в области генерации.

### 3.3 Описание модели кинетики

Для анализа динамики переноса фотогенерированных электронов и дырок в предложенной резонансно-туннельной структуре (рис. 3.2) разработана дискретная модель, учитывающая пространственно-временную эволюцию концентраций носителей в системе связанных квантовых ям. Модель основана на системе балансных уравнений, связывающих процессы генерации, рекомбинации и туннелирования. Каждая квантовая яма рассматривается как отдельная подсистема с локализованными носителями, что позволяет учесть асимметрию туннельных переходов ( $N4 \rightarrow N5$  для электронов,  $N4 \rightarrow N3$  для дырок).

для электронной подсистемы:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dn_0}{dt} = g - \frac{n_0 - n_1}{t_0} - Bn_0p_0 \\ \frac{dn_1}{dt} = \frac{n_0 - n_1}{t_0} - \frac{n_1 - n_2}{t_1} \\ \frac{dn_2}{dt} = \frac{n_1 - n_2}{t_1} - \frac{n_2 - n_3}{t_2} \\ \frac{dn_3}{dt} = \frac{n_2 - n_3}{t_2} - \frac{n_3 - n_4}{t_3} \\ \frac{dn_4}{dt} = \frac{n_3 - n_4}{t_3} - \frac{n_4}{t_{out}} \end{array} \right. \quad (3.1)$$

для подсистемы дырок:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dp_0}{dt} = g - \frac{p_0 - p_1}{\tau_0} - Bn_0p_0 \\ \frac{dp_1}{dt} = \frac{p_0 - p_1}{\tau_0} + \frac{p_2 - p_1}{\tau_1} \\ \frac{dp_2}{dt} = \frac{p_1 - p_2}{\tau_1} + \frac{p_3 - p_2}{\tau_2} \\ \frac{dp_3}{dt} = \frac{p_2 - p_3}{\tau_2} - \frac{p_3}{\tau_{out}} \end{array} \right. \quad (3.2)$$

Здесь  $n_0, n_1, n_2, n_3, n_4$  - концентрация неравновесных электронов в квантовых ямах N4-N8 соответственно, а  $p_0, p_1, p_2, p_3$  - концентрация неравновесных дырок в ямах N1-N4,  $\tau_0, \tau_1, \tau_2, \tau_3$  - времена туннелирования для электронных переходов N4→N5, N5→N6, N6→N7, N7→N8, а  $t_0, t_1, t_2$  времена туннелирования для дырочных переходов N4→N3, N3→N2, N2→N1,  $\tau_{out}$  и  $t_{out}$  - времена выхода в континуум из ям N8 и N1 (за счет туннелирования, теплового возбуждения и т.д.),  $g$  – скорость возбуждения электронно-дырочных пар,  $B$  – вероятность рекомбинации. Разработанная модель количественно связывает кинетику транспорта с эффективностью фотоэлектрического преобразования, предоставляя инструмент для проектирования резонансно-туннельных структур с контролируемыми параметрами.

В предложенной модели фотогенерированные электроны и дырки селективно возбуждаются в наиболее глубокой квантовой яме N4 (рис. 3.2) за счёт поглощения фотонов в длинноволновой области спектра ( $\lambda > 800\text{нм}$ ), соответствующей минимальной энергии межзонных переходов в системе GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As. Глубина ямы N4 обеспечивает локализацию носителей в низкоэнергетических состояниях, что минимизирует термическую эмиссию и усиливает роль туннельных процессов. После возбуждения электроны последовательно туннелируют через ямы N5–N8, а дырки — через ямы N3–N1, что приводит к их переходу в непрерывный спектр (зонные состояния) с последующим участием в формировании фототока.

Ключевым элементом механизма экстракции является явление последовательного резонансного туннелирования, при котором каждый туннельный переход между соседними ямами происходит при резонансном согласовании подзон. Эффективность этого процесса определяется геометрией гетероструктуры: ширина и высота барьеров между ямами спроектированы таким образом, что эффективная высота барьера монотонно уменьшается по мере удаления от ямы N4 (рис. 3.2). Это снижение мощности барьеров обусловлено изменением положения подзон в квантовых ямах с заданным шагом в 45 мэВ. Тем самым, времена туннелирования для соседних квантовых ям будут иметь экспоненциально убывающий характер, и тогда можно записать условия:  $\tau_0 \gg \tau_1 \gg \tau_2 \gg \tau_3 \gg \tau_{out}$  и  $t_0 \gg t_1 \gg t_2 \gg t_{out}$ .

Тогда при учете данного условия получаем аналитическое выражение для плотности фототока (Приложение 3.1):

$$J \approx \frac{e}{B\tau_0 t_0} (\sqrt{1 + 4gB\tau_0 t_0} - 1), \quad (3.3)$$

Где  $B$  – параметр, определяющий темп рекомбинации,  $\text{см}^2/\text{с}$ ;  $\tau_0$  – время туннелирования дырок из крайней квантовой ямы;  $t_0$  – время туннелирования электронов из крайней квантовой ямы;  $g$  – темп генерации в пустой квантовой яме.

Таким образом, для модели фотостимулированного транспорта плотность выходного тока определяется скоростью генерации электронно-дырочной пары, вероятностью рекомбинации и временами туннелирования электронов и дырок из глубокой квантовой ямы серии. В представленной модели согласование подзон соседних ям обеспечивает минимизацию потерь на оже-рекомбинацию, так как носители быстро покидают область генерации (N4). Градиентное уменьшение мощности барьеров путем изменения положения подзон в последовательности КЯ предотвращает накопление пространственного заряда, снижая электрическое поле, которое могло бы деформировать подзоны. Разделение резонансно-туннельных каналов извлечения для электронов (N5–N8) и дырок (N3–N1) исключает их рекомбинацию в промежуточных ямах. Отдельно в Приложении 3.2 приведено сравнение основной модели кинетики (3.3) и полной модели учитывающей поглощение и рекомбинацию во всех квантовых ямах структуры.

### 3.4 Обсуждение результатов

Таким образом, скорость генерации электронно-дырочной пары, вероятность рекомбинации и время туннелирования электрона и дырки из самой глубокой квантовой ямы определяют плотность выходного тока. Далее проведено качественное исследование модели фотостимулированного транспорта в системе квантовых ям помещенных в  $i$ -область  $p$ - $i$ - $n$  перехода.

На основе модели расчета, изложенной в работе [4], провели расчет времён туннелирования для квантовых ям  $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ . В работе [4] расчеты времен туннелирования проводились для системы квантовых ям из  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ , в которых эффективная масса электронов меньше, чем в случае квантовых ям  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . Для случая  $\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$  с шириной разделяющего барьера 5 нм. время туннелирования составляет 75 пс. В нашем случае, для системы  $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  времена туннелирования из глубокой квантовой ямы №4 составят  $\tau_0 = 50$  пс, для электронов и  $t_0 = 1$  нс для тяжелых дырок. Для последующих квантовых ям, времена туннелирования будут уменьшаться, за счет уменьшения мощности барьеров разделяющих их.

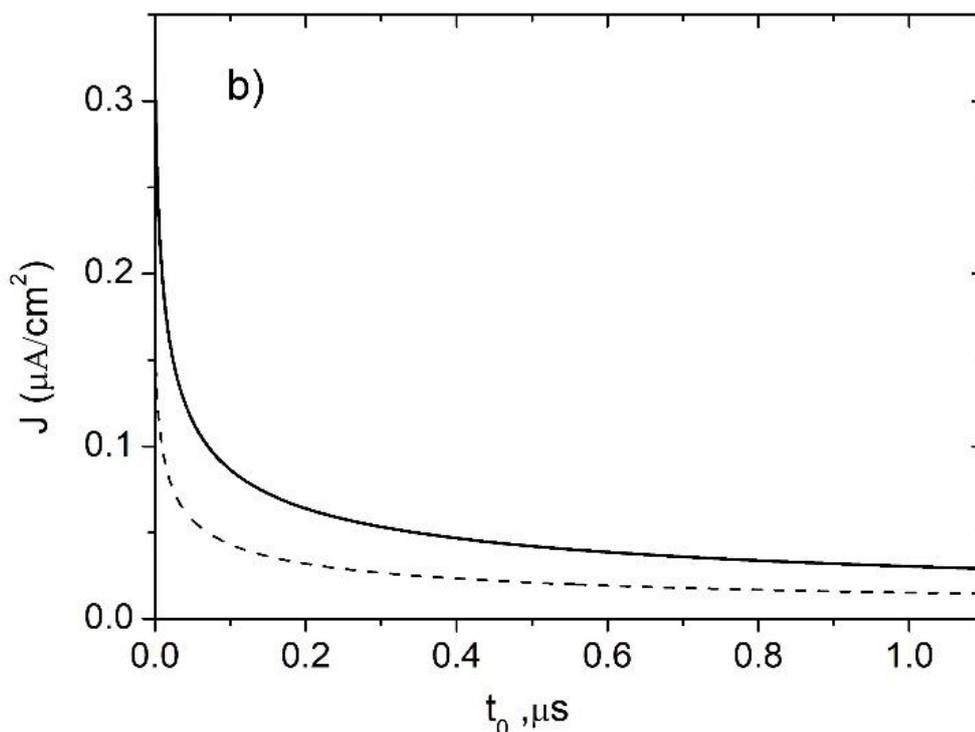
В качестве величины темпа оптической генерации фотоносителей будем использовать значение  $10^{14} \text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$ , рассчитанное ранее в этой главе. В качестве темпа рекомбинации воспользуемся значением  $B = 10^6 \text{ см}^2\text{с}^{-1}$ , определенном на основе характерного времени рекомбинации  $T_{\text{рек}}=800\text{-}1000$  псек. [46]. Тем самым, расчетные

значения в рамках заявленной модели проводятся для значений параметров  $\tau_0 = 50$  пс,  $t_0 = 1$  нс,  $g = 10^{14}$  см<sup>-2</sup>с<sup>-1</sup>,  $B = 10^6$  см<sup>2</sup>с<sup>-1</sup>, характерных для рассматриваемой системы [4-6].

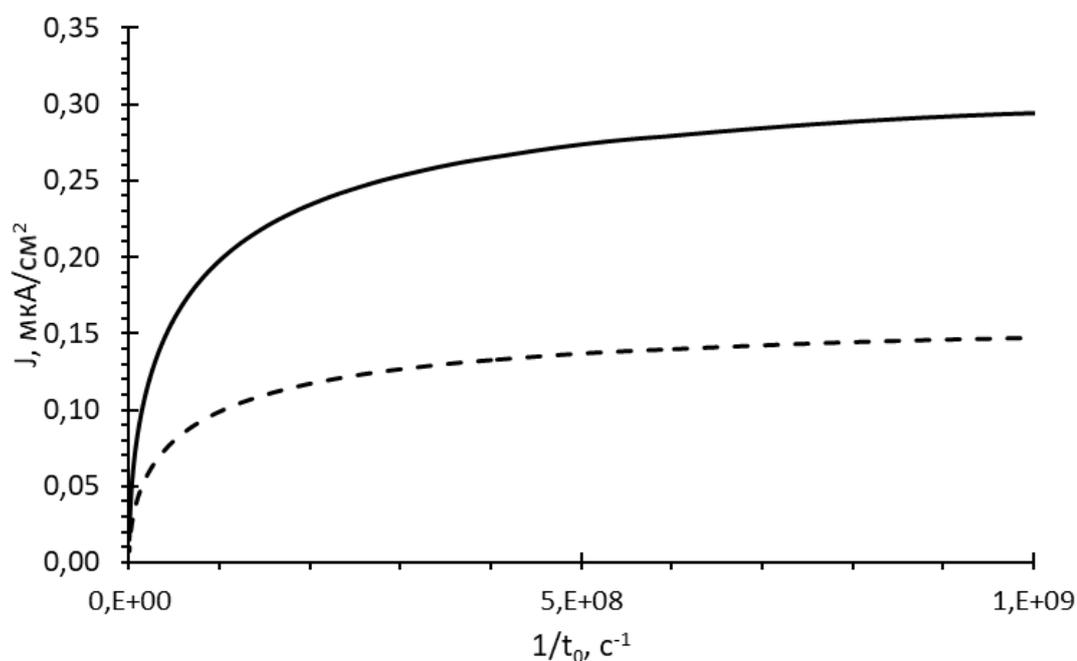
Теоретически расчётные данные, представленные на рис. 3.3 и 3.4, демонстрируют критическую зависимость фототока от времени туннелирования дырок  $t_0$ , подтверждая необходимость наличия дырочного транспортного канала для эффективного извлечения фотоносителей и преобразования оптической энергии в предложенной резонансно-туннельной структуре. Анализ кривых полного фототока  $J$  и его компонент (электронной  $J_e$  и дырочной  $J_h$ ) выявил синхронное снижение всех составляющих при увеличении  $t_0$  (рис. 3.5). При  $t_0 \rightarrow \infty$ , что соответствует полному блокированию дырочного канала, фототок стремится к нулю, несмотря на сохранение прозрачности электронного туннельного канала. Этот результат указывает на фундаментальную взаимосвязь между транспортом электронов и дырок, обусловленную электронейтральностью системы: накопление фотодырок в квантовой яме N4 при отсутствии их выноса приводит к росту скорости рекомбинации  $R(n,p)$ , что подавляет как дырочную, так и электронную компоненты тока.

Дополнительным подтверждением данного механизма служат расчётные зависимости плотности туннельного тока  $J_{\text{тун}}$  от темпа оптической генерации  $g$  при различных значениях параметра рекомбинации  $B$  (рис. 3.5). Увеличение  $B$ , соответствующее сокращению времени жизни носителей  $\tau_{\text{рек}} \sim 1/B$ , вызывает значительное снижение  $J_{\text{тун}}$  из-за доминирования рекомбинационных процессов над туннельными. Ключевым фактором является зависимость фототока от времён туннелирования как электронов  $\tau_0$ , так и дырок  $t_0$  из возбуждённой ямы N4. Рост  $t_0$  (уменьшение прозрачности дырочного канала) приводит к накоплению дырок в яме N4, что увеличивает локальную концентрацию  $p$  и, как следствие, скорость рекомбинации  $R = Bnp$ . Помимо этого, рост  $t_0$  приводит к нарушению квазинейтральности, создающему электрическое поле, которое замедляет туннелирование электронов через барьер в электронной подсистеме.

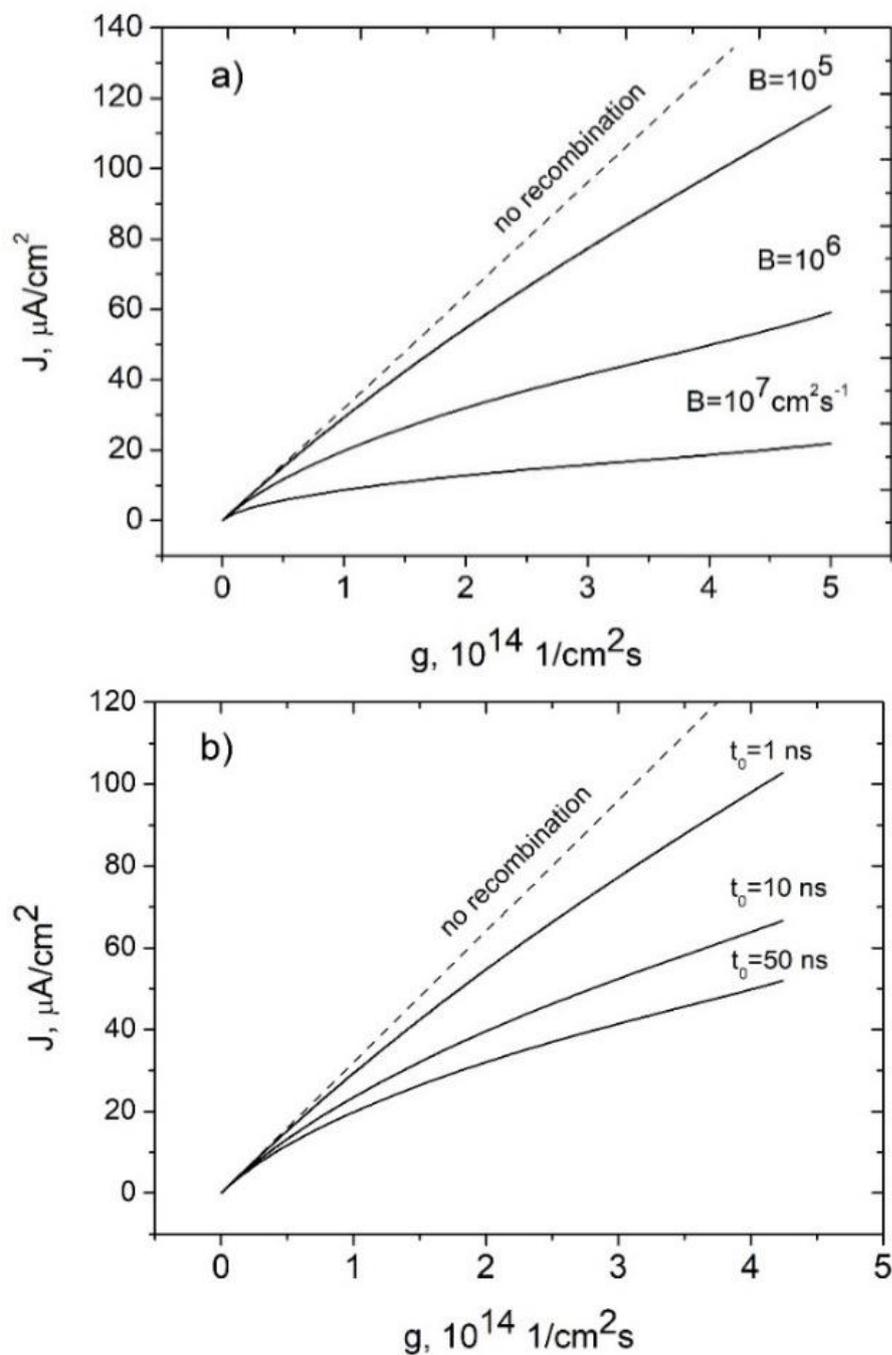
Совокупность этих эффектов объясняет наблюдаемое падение  $J$  с увеличением  $t_0$ , иллюстрируемое на рис. 3.3. Полученные результаты подчёркивают необходимость одновременной оптимизации резонансно-туннельных каналов для электронов и дырок в исследуемой структуре. Для минимизации рекомбинационных потерь требуется обеспечение условий, при которых времена туннелирования  $\tau_0$ ,  $t_0$  существенно меньше времени жизни носителей  $\tau_{\text{реком}}$ . Разработанная модель позволяет количественно оценить эффективность извлечения фотоносителей в зависимости от прозрачности дырочного резонансно-туннельного канала.



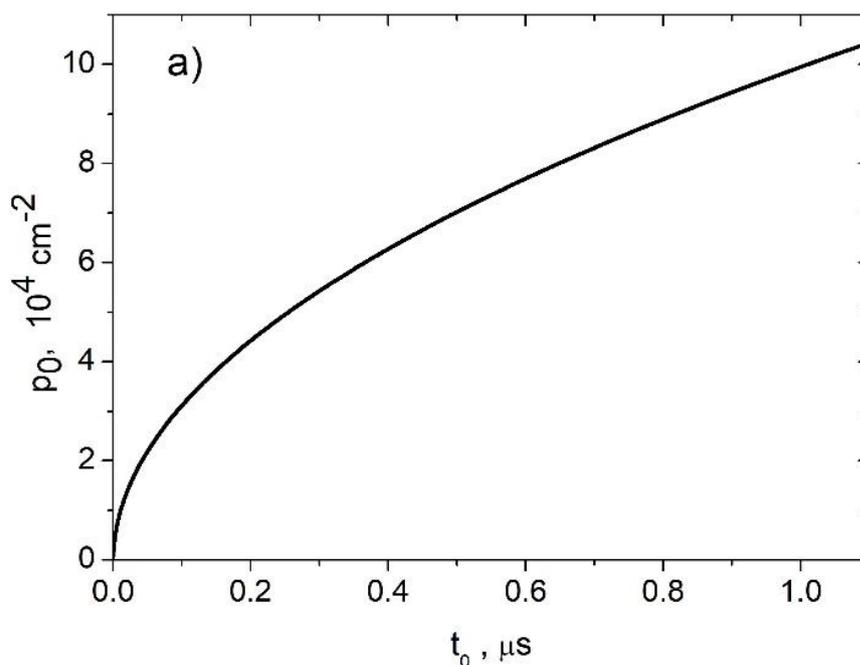
**Рисунок 3.3** Зависимость фототока от времени туннелирования дырки ( $V=10^6 \text{ см}^2\text{с}^{-1}$ ,  $g=10^{14} \text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$ ,  $\tau_0 = 50 \text{ пс}$ , сплошная линия - полный фототок, штриховая линия - электронная составляющая). – перенести в начало



**Рисунок 3.4** Зависимость фототока от обратного времени туннелирования дырок ( $V=10^6 \text{ см}^2\text{с}^{-1}$ ,  $g=10^{14} \text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$ ,  $\tau_0 = 50 \text{ пс}$ , сплошная линия - полный фототок, штриховая линия - электронная составляющая) – перенести в начало



**Рисунок 3.5** Зависимость плотности фототока от скорости генерации электронно-дырочной пары: а) для нескольких значений параметра рекомбинации  $B$  ( $\tau_0 = 50 \text{ пс}$ ,  $t_0 = 1 \text{ нс}$ ); б) для нескольких значений времени туннелирования дырки от квантовой ямы №4 ( $\tau_0 = 50 \text{ пс}$ ,  $B = 10^6 \text{ см}^2\text{с}^{-1}$ ).



**Рисунок 3.6** Зависимость стационарной плотности дырок в глубокой квантовой яме №4 от времени туннелирования дырок ( $B=10^6 \text{ см}^2\text{с}^{-1}$ ,  $g=10^{14} \text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$ ,  $\tau_0=50 \text{ пс.}$ ).

В рамках анализа электронной структуры низкоразмерных систем особый интерес представляет оценка влияния электрического поля, индуцированного пространственным зарядом дырок, на положение подзон электронной подсистемы. Проведённые расчёты демонстрируют, что в интервале концентраций дырок  $p_0 \leq 10^7 \text{ см}^{-2}$ , достигаемом при времени туннелирования  $t_0 \approx 50 \text{ мкс.}$ , создаваемое ими электрическое поле не оказывает существенного воздействия на электронные подзоны. Величина поля  $F$ , возникающего вследствие пространственного заряда дырок, определяется выражением:

$$F = \frac{2\pi e p_0}{\epsilon}, \quad (3.5)$$

где  $e$  — элементарный заряд,  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость материала.

Для  $p_0 = 10^7 \text{ см}^{-2}$  и  $\epsilon = 12,9\epsilon_0$  (GaAs) расчётное поле составляет  $F \approx 1 \text{ В/см.}$  Данное значение на четыре порядка меньше характерного электрического поля р-і-п перехода  $F_{p-i-n} = 1,5 \cdot 10^4 \text{ В/см}$ , ответственного за разделение фотогенерированных носителей в исследуемой гетероструктуре. Такое соотношение полей  $F \ll F_{p-i-n}$  указывает на то, что локальное искажение потенциала, вызванное пространственным зарядом дырок, не приводит к значительной модификации электронных подзон. Следовательно, вклад данного эффекта в рекомбинационные потери или транспортные характеристики системы пренебрежимо мал. Таким образом, в рамках моделирования электронного транспорта в структурах с квантовыми ямами при  $p_0 \leq 10^7 \text{ см}^{-2}$ , влияние

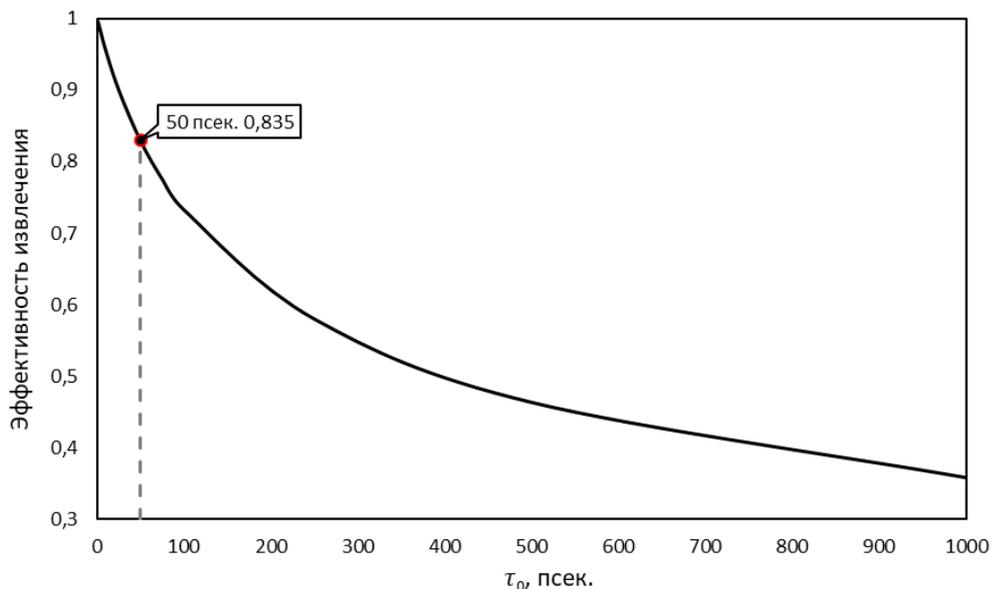
поля пространственного заряда дырок может быть исключено из рассмотрения, что существенно упрощает расчётную модель без потери точности. Полученные результаты согласуются с теоретическими предсказаниями для систем с низкой плотностью нескомпенсированного заряда [5], где доминирующий вклад в потенциал вносит внешнее поле p-i-n перехода.

Далее проведем оценку эффективности извлечения фотоносителей для разработанной структуры с последовательностью квантовых ям помещенных в i-область p-i-n перехода.

$$\eta = \frac{1}{2gB\tau_0t_0} \left( \sqrt{1 + 4gB\tau_0t_0} - 1 \right), \quad (3.6)$$

Получаем, что эффективность извлечения фотоносителей из последовательности квантовых ям определяется параметром рекомбинации (B), темпом генерации (g) и времен туннелирования  $\tau_0$ ,  $t_0$ .

Для оценки эффективности извлечения воспользуемся уравнением (3.5), при характерных временах рекомбинации, фиксированном темпе генерации ( $g=10^{14} \text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$ ), и временах туннелирования ( $\tau_0=50 \text{ пс}$ ,  $t_0=1 \text{ нс}$ ). Зависимость оценки эффективности извлечения фотоносителей от времени туннелирования электронов из глубокой квантовой ямы приведена на рисунке 3.7.



**Рисунок 3.7.** Оценка эффективности извлечения фотоносителей для разработанной структуры в зависимости от времени туннелирования из глубокой квантовой ямы

Согласно представленной модели, фотогенерированные носители, вышедшие из глубокой квантовой ямы №4, далее беспрепятственно туннелируют по резонансно-туннельным каналам и выходят в непрерывный спектр. Получаем, что при характерных величинах ( $B=5 \cdot 10^6 \text{ см}^2\text{с}^{-1}$ ,  $g=10^{14} \text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$ ,  $\tau_0 = 50 \text{ пс.}$ ,  $t_0=1 \text{ нс.}$ ) эффективность извлечения составляет более 80 %.

### 3.5 Выводы по главе

В рамках проведённого исследования третьей главы теоретически подтверждена возможность эффективного извлечения фотогенерированных носителей заряда из глубоких квантовых ям посредством механизма последовательного резонансного туннелирования. Ключевым результатом работы стал вывод о возможной реализации одновременных резонансно-туннельных каналов выхода для электронной и дырочных подсистем. Детальный анализ кинетики модельной структуры, основанный на решении системы балансных уравнений с учётом времён туннелирования и рекомбинационных процессов, продемонстрировал, что подавление резонансного туннелирования дырок приводит не только к исчезновению дырочного фототока, но и к критическому снижению электронной компоненты. Это свидетельствует о сильной корреляции между каналами движения разнотипных носителей, обусловленной электронейтральностью системы и конкуренцией процессов рекомбинации.

На основе выявленных закономерностей разработана резонансно-туннельная гетероструктура с последовательностью квантовых ям GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As, параметры которой (ширина ям, высота барьеров, степень легирования) оптимизированы для обеспечения условий согласования подзон в последовательности квантовых ям, и реализации резонансно-туннельных каналов для электронов и тяжёлых дырок. В предложенной конструкции реализовано резонансное согласование подзон основного состояния соседних квантовых ям, что обеспечивает: минимизацию времён туннелирования за счёт снижения эффективной высоты барьеров и увеличения туннельного матричного элемента от перекрытия волновых функций в барьере от соседних квантовых ям. Синхронизацию потоков электронов и дырок, предотвращающую накопление пространственного заряда в глубокой квантовой яме.

В качестве примера приведена конкретная структура с последовательностью квантовых ям, параметры которой оптимизированы для обеспечения эффективного транспортирования носителей заряда. В данной структуре реализован режим резонансного согласования энергетических подзон основного состояния внутри всей последовательности квантовых ям, что существенно улучшает условия туннелирования.

Проведённая оценка эффективности извлечения фотогенерированных носителей в предложенной резонансно-туннельной структуре показала высокую степень извлечения носителей заряда. Для типичных времён рекомбинации  $t_r \sim 10^{-9}$  сек. и времен туннельного перехода  $\tau_0 = 50 \cdot 10^{-12}$  сек. эффективность извлечения составила более 80%. Эти результаты подтверждают перспективность использования процесса резонансного туннелирования для обеспечения эффективной фотоэлектронной экстракции и демонстрируют возможность его применения в фотонных и оптоэлектронных устройствах.

### Приложение 3.1

Для описания динамики электронов и дырок в системе последовательных квантовых ям (КЯ) GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As была сформулирована система балансных уравнений между приходом носителей и уходом из квантовой ямы. Данная модель учитывает только селективное возбуждение фотоносителей из глубокой квантовой ямы №4 с нижних подзон. Рекомбинация в такой системе происходит только в глубокой квантовой яме №4.

Система балансных уравнений для электронной подсистемы:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dn_0}{dt} = g - \frac{n_0 - n_1}{t_0} - Bn_0p_0 \\ \frac{dn_1}{dt} = \frac{n_0 - n_1}{t_0} - \frac{n_1 - n_2}{t_1} \\ \frac{dn_2}{dt} = \frac{n_1 - n_2}{t_1} - \frac{n_2 - n_3}{t_2} \\ \frac{dn_3}{dt} = \frac{n_2 - n_3}{t_2} - \frac{n_3 - n_4}{t_3} \\ \frac{dn_4}{dt} = \frac{n_3 - n_4}{t_3} - \frac{n_4}{t_{out}} \end{array} \right. \quad (3.1.1)$$

Система балансных уравнений для подсистемы дырок:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dp_0}{dt} = g - \frac{p_0 - p_1}{\tau_0} - Bn_0p_0 \\ \frac{dp_1}{dt} = \frac{p_0 - p_1}{\tau_0} + \frac{p_2 - p_1}{\tau_1} \\ \frac{dp_2}{dt} = \frac{p_1 - p_2}{\tau_1} + \frac{p_3 - p_2}{\tau_2} \\ \frac{dp_3}{dt} = \frac{p_2 - p_3}{\tau_2} - \frac{p_3}{\tau_{out}} \end{array} \right. \quad (3.1.2)$$

Здесь  $n_0, n_1, n_2, n_3, n_4$  - концентрация неравновесных электронов в квантовых ямах N4-N8 соответственно, а  $p_0, p_1, p_2, p_3$  — концентрация неравновесных дырок в ямах N1-N4,  $\tau_0, \tau_1, \tau_2, \tau_3$  подходит для туннелирования для электронных переходов N4→N5, N5→N6, N6→N7, N7→N8, а  $t_0, t_1, t_2$  запускают процессы туннелирования для дырочных переходов N4→N3, N3→N2, N2→N1,  $\tau_{out}$  и  $t_{out}$  времена выхода в континуум из ям N8 и N1 (за счет туннелирования, теплового возбуждения и т.д.),  $g$  – скорость возбуждения электронно-дырочных пар,  $B$  – вероятность рекомбинации.

В стационарном режиме определяем стационарную концентрацию электронов в квантовой яме №4:

$$n_0 = n_4 \left( 1 + \frac{\tau_0}{\tau_{out}} + \frac{\tau_1}{\tau_{out}} + \frac{\tau_2}{\tau_{out}} + \frac{\tau_3}{\tau_{out}} \right) \quad (3.1.3)$$

$$n_4 = n_0 \frac{\tau_{out}}{T_e} \quad (3.1.4)$$

$$T_e = (\tau_{out} + \tau_0 + \tau_1 + \tau_2 + \tau_3) \quad (3.1.5)$$

а для плотности дырок в возбужденной квантовой яме получаем:

$$p_0 = p_3 \left( 1 + \frac{t_0}{t_{out}} + \frac{t_1}{t_{out}} + \frac{t_2}{t_{out}} \right) \quad (3.1.6)$$

$$p_3 = p_0 \frac{t_{out}}{T_p} \quad (3.1.7)$$

$$T_p = (t_{out} + t_0 + t_1 + t_2) \quad (3.1.8)$$

Тогда получим следующее выражение для плотности фототока:

$$J = e \frac{n_4}{t_{out}} + e \frac{p_3}{\tau_{out}} = \frac{e}{BT_e T_p} \left( \sqrt{1 + 4gBT_e T_p} - 1 \right) \quad (3.1.9)$$

Можно отметить, что по мере продвижения по последовательности квантовых ям (рис. 3.1) мощность барьеров, разделяющая их будет уменьшаться. Следовательно в времена туннелирования для такой последовательности будут иметь экспоненциально убывающую зависимость, что и отражено в виде условия:

$$\tau_0 \gg \tau_1 \gg \tau_2 \gg \tau_3 \gg \tau_{out} \quad (3.1.10)$$

$$t_0 \gg t_1 \gg t_2 \gg t_{out} \quad (3.1.11)$$

Тогда  $T_e \approx \tau_0$  и  $T_p \approx t_0$ . Получаем аналитическое выражение плотности фототока:

$$J \approx \frac{e}{B\tau_0 t_0} \left( \sqrt{1 + 4gB\tau_0 t_0} - 1 \right) \quad (3.1.12)$$

Следовательно, плотность полного фототока определяется величинами: темпом оптической генерации  $g$ , параметром рекомбинации  $B$ , и временами туннелирования  $\tau_0$  и  $t_0$  для электронов и дырок из глубокой квантовой ямы №4. Согласно представленной модели, фотогенерированные носители, вышедшие из глубокой квантовой ямы №4, далее беспрепятственно туннелируют по резонансно-туннельным каналам и выходят в непрерывный спектр. Эффективность выноса для представленной модели составляет более 80 % фотоносителей селективно возбужденных в КЯ №4.

### Приложение 3.2

Для описания динамики электронов и дырок в системе последовательных квантовых ям (КЯ) GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As была сформулирована система балансных уравнений, учитывающая процессы генерации, рекомбинации и туннелирования носителей. Оптическая генерация  $g_i$  учитывает возбуждение носителей только в пределах зоны поглощения КЯ GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As, что обеспечивает селективное заполнение энергетических уровней. Рекомбинационные параметры  $B_i$  включают вклад только излучательных переходов.

Система балансных уравнений для электронной подсистемы:

$$\begin{aligned}\frac{dn_1}{dt} &= g_1 - \frac{n_1}{t_{12}} - Bn_1p_1 \\ \frac{dn_2}{dt} &= g_2 + \frac{n_1}{t_{12}} - \frac{n_2}{t_{23}} - Bn_2p_2 \\ \frac{dn_3}{dt} &= g_3 + \frac{n_2}{t_{23}} - \frac{n_3}{t_{34}} - Bn_3p_3 \\ \frac{dn_4}{dt} &= g_4 + \frac{n_3}{t_{34}} - \frac{n_4 - n_5}{t_{45}} - Bn_4p_4 \\ \frac{dn_5}{dt} &= g_5 + \frac{n_4 - n_5}{t_{45}} - \frac{n_5 - n_6}{t_{56}} - Bn_5p_5 \\ \frac{dn_6}{dt} &= g_6 + \frac{n_5 - n_6}{t_{56}} - \frac{n_6 - n_7}{t_{67}} - Bn_6p_6 \\ \frac{dn_7}{dt} &= g_7 + \frac{n_6 - n_7}{t_{67}} - \frac{n_7 - n_8}{t_{78}} - Bn_7p_7 \\ \frac{dn_8}{dt} &= g_8 + \frac{n_7 - n_8}{t_{78}} - \frac{n_8}{t_{out}} - Bn_8p_8\end{aligned}$$

Система балансных уравнений для подсистемы дырок:

$$\begin{aligned}\frac{dp_1}{dt} &= g_1 + \frac{p_2 - p_1}{\tau_{12}} - \frac{p_1}{\tau_{out}} - Bn_1p_1 \\ \frac{dp_2}{dt} &= g_2 + \frac{p_3 - p_2}{\tau_{23}} - \frac{p_2 - p_1}{\tau_{12}} - Bn_2p_2 \\ \frac{dp_3}{dt} &= g_3 + \frac{p_4 - p_3}{\tau_{34}} - \frac{p_3 - p_2}{\tau_{23}} - Bn_3p_3 \\ \frac{dp_4}{dt} &= g_4 + \frac{p_5}{\tau_{54}} - \frac{p_4 - p_3}{\tau_{34}} - Bn_4p_4 \\ \frac{dp_5}{dt} &= g_5 + \frac{p_6}{\tau_{65}} - \frac{p_5}{\tau_{54}} - Bn_5p_5 \\ \frac{dp_6}{dt} &= g_6 + \frac{p_7}{\tau_{76}} - \frac{p_6}{\tau_{65}} - Bn_6p_6\end{aligned}$$

$$\frac{dp_7}{dt} = g_7 + \frac{p_8}{\tau_{87}} - \frac{p_7}{\tau_{76}} - Bn_7p_7$$

$$\frac{dp_8}{dt} = g_8 - \frac{p_8}{\tau_{87}} - Bn_8p_8$$

Времена туннелирования определены на основе модели, предложенной в работе [4], с модификациями для системы GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As. В отличие от рассмотренной в [4] гетероструктуры In<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As/GaAs с меньшей эффективной массой электронов (0.04m<sub>0</sub>), для GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As эффективная масса электронов выше (0.067m<sub>0</sub>), что увеличивает высоту потенциального барьера и модифицирует немного туннельные вероятности. В нашем случае, для системы GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As времена туннелирования из глубокой квантовой ямы №4 составят τ<sub>0</sub> = 67 пс, для электронов и t<sub>0</sub> = 732 пс для тяжелых дырок. Для последующих квантовых ям, времена туннелирования будут уменьшаться, за счет уменьшения мощности барьеров разделяющих их. Времена туннелирования для системы квантовых ям приведены в таблице 3.2.1. Сравнение результатов плотности фототока в структуре с квантовыми ямами для основной и полной модели приведено на рисунке 3.2.1.

Таблица 3.2.1 – Времена туннелирования из КЯ

№ КЯ	1	2	3	4	5	6	7	8
t <sub>e</sub> 10 <sup>-12</sup> , сек.	4816	5870	7120	67	33,2	14	4,76	1,904
t <sub>hh</sub> 10 <sup>-12</sup> , псек.	34,656	91,2	340	732	39368	32452	27664	23940
g 10 <sup>14</sup> , 1/сек	0,2	0,53	1,25	2,5	1,76	1,25	0,56	0,2
B 10 <sup>5</sup>	0,1	0,5	1	10	2,5	1	0,5	0,1

Уменьшение эффективной высоты барьеров между последующими КЯ приводит к снижению времен туннелирования. Например, для КЯ №3 и №2 наблюдается сокращение τ<sub>0</sub> на 70% на каждую ступень из-за уменьшения мощности барьерных слоев. Данная зависимость согласуется с экспоненциальной чувствительностью туннельного тока к параметрам барьера [4]. Предложенная модель позволяет анализировать неравновесные процессы в каскадных структурах с учетом спектрально-селективной генерации и асимметрии времен туннелирования для электронов и дырок. Полученные значения τ<sub>0</sub> и t<sub>0</sub> могут быть использованы для оптимизации эффективности фотоэлектрических преобразователей на основе гетероструктур GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As.

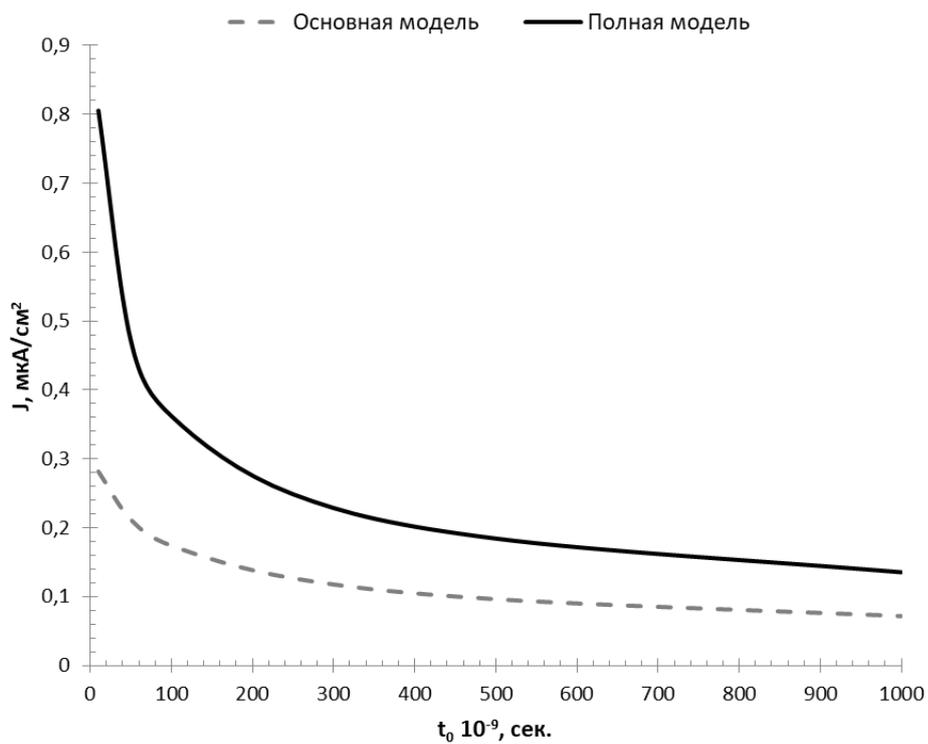


Рисунок 3.2.1 – Сравнение результатов плотности фототока в структуре с квантовыми ямами для системы балансных уравнений основной и полной модели кинетики.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Далее представлены основные результаты диссертационной работы:

1. Представлена методика конструирования резонансно-туннельных структур из квантовых ям, обеспечивающая эффективное извлечение носителей в непрерывный спектр благодаря резонансно-туннельным каналам выноса, как для электронов, так и для дырок. Методика основана на управлении уровнями размерного квантования посредством введения в квантовые ямы серии тонких туннельно-прозрачных барьеров определенной конфигурации.
2. Исследована кинетика фотогенерированных носителей заряда в резонансно-туннельных структурах с квантовыми ямами. Показано, что в таких структурах можно реализовать эффективный вынос фотогенерированных носителей заряда из квантовых ям в непрерывный спектр.
3. Установлены зависимости фототока от темпа генерации, интенсивности рекомбинации и времени туннелирования электронов и дырок.
4. Для реализации фотовольтаического преобразования в резонансно-туннельной структуре, встроенной в р-і-п элемент, необходимо одновременно обеспечить резонансно-туннельный транспорт как для электронов, так и для дырок.
5. Проведено теоретическое исследование основного уровня энергии экситонов в квантовых ямах с тонкими барьерами. Получены зависимости энергии связи экситонов от количества и конфигурации введенных барьеров. Результаты расчетов получили экспериментальное подтверждение.
6. Показано, что энергия связи экситонов немонотонным образом зависит от доли, занимаемой вводимыми барьерами в квантовой яме – сначала наблюдается рост, а затем падение энергии связи.

## ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

По теме диссертационной работы опубликовано 4 работы, из которых: 2 научные статьи в высокорейтинговых научных журналах индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus, 2 материалов научных конференций и семинаров в виде тезисов докладов. Автор принимал участие в научных конференциях и семинарах с докладом по диссертационной работе, в общем итоге выполнено 7 докладов, 5 из них на международных и российских научных конференциях и 2 доклада на семинарах отделения физики твердого тела Физического института имени П. Н. Лебедева РАН.

### Публикации в журналах:

1. Klemmer, P. S., Mityagin, Y. A., Telenkov, M. P., Nagaraja, K. K., Elantsev, D. A., & Amiri, S. Resonant tunneling in GaAs/AlGaAs quantum well system for solar photovoltaics. *Superlattices and Microstructures*, 140, 106472.  
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2020.106472>
2. Mityagin, Y. A., Klemmer, P. S., Telenkov, M. P., Kumar, R., & Nagaraja, K. K. Kinetics of Photostimulated Transport in Resonant Tunneling Quantum Well Structures in the Electric Field of a p-i-n Photovoltaic Cell. *Bulletin of the Lebedev Physics Institute*, 49(6), 151-157.  
DOI: <https://doi.org/10.3103/S1068335622060069>
3. Перестройка энергий подзон в структурах из квантовых ям при введении в ямы тонких туннельно-прозрачных барьеров, Воронова В.В., Митягин Ю.А., Теленков М.П., Клеммер П.С., Савинов С.А., Пашкеев Д.А., Мартовицкий В.П., В сборнике: Лазерные, плазменные исследования и технологии - ЛаПлаз-2023. Сборник научных трудов IX Международной конференции. Москва, 2023. С. 201.
4. Спектры экситонов в квантовой яме со встроенной серией тонких туннельно-прозрачных барьеров, Клеммер П.С., Митягин Ю.А., Теленков М.П., Карцев П.Ф., Савинов С.А., Воронова В.В., Пашкеев Д.А., Мартовицкий В.П., В сборнике: Лазерные, плазменные исследования и технологии - ЛаПлаз-2023. Сборник научных трудов IX Международной конференции. Москва, 2023. С. 223.

### Результаты по диссертационной работе докладывались на:

1. Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2019» (МГУ, 2019);

2. Объединённой Международной Конференции по физике конденсированного состояния Европейского физического общества и Королевского физического общества Испании (CMD2020GEFES, 2020);
3. Международном симпозиуме «Нанопизика и наноэлектроника» XXVII со стендовым докладом по Физике Полупроводников (Нижний Новгород, 2023);
4. Международной конференции IX «Лазерные, плазменные исследования и технологии» (Москва, МИФИ, 2023);
5. Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2023» (МГУ, 2023);
6. Выступление с докладом на семинаре Отделения физики твёрдого тела Физического института имени П. Н. Лебедева РАН 30.04.2021 г. и 30.06.2023 г.

## СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Parida B., Iniyar S., Goic R. A review of solar photovoltaic technologies //Renewable and sustainable energy reviews. – 2011. – Т. 15. – №. 3. – С. 1625-1636.
- [2] Khamooshi M. et al. A review of solar photovoltaic concentrators //International Journal of Photoenergy. – 2014. – Т. 2014.
- [3] Yang R. Review of Photovoltaic Cell Technology Development //Energy and Power Engineering. – 2022. – Т. 14. – №. 10. – С. 541-549.
- [4] М.П. Теленков, Ю. А. Митягин, Resonant-tunneling structure of quantum wells in the p-i-n photovoltaic element, Bull. Lebedev Phys. Inst. 40 (2013) 346.
- [5] К.К. Nagaraja, М.П. Теленков, I.P. Kazakov, S.A. Savinov, Yu A. Mityagin, Development of GaAs/AlGaAs quantum well structures providing a resonant tunneling regime in an electric field of p-i-n junction, Mater. Today: Proc. 3 (2016) 2744–2747.
- [6] К.К. Nagaraja, М.П. Теленков, I.P. Kazakov, S.A. Savinov, Yu A. Mityagin, Resonant tunneling GaAs/AlGaAs quantum well structures for p-i-n photovoltaic cells, Bull. Lebedev Phys. Inst. 44 (2017) 72.
- [7] Mityagin Y. A. et al. Kinetics of Photostimulated Transport in Resonant Tunneling Quantum Well Structures in the Electric Field of a p–i–n Photovoltaic Cell //Bulletin of the Lebedev Physics Institute. – 2022. – Т. 49. – №. 6. – С. 151-157.
- [8] Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников. – 1977.
- [9] K.W.J. Barnham, G. Duggan, A new approach to high efficiency multibandgap solar cells, J. Appl. Phys. 67 (1990) 3490.
- [10] Shockley W. The Theory of p-n Junctions in Semiconductors and p-n Junction Transistors //Bell system technical journal. – 1949. – Т. 28. – №. 3. – С. 435-489.
- [11] Conibeer G. Third-generation photovoltaics //Materials today. – 2007. – Т. 10. – №. 11. – С. 42-50.
- [12] Barnham K. et al. Quantum well solar cells //Applied Surface Science. – 1997. – Т. 113. – С. 722-733.
- [13] Barnham K. et al. Voltage enhancement in quantum well solar cells //Journal of Applied Physics. – 1996. – Т. 80. – №. 2. – С. 1201-1206.
- [14] K.W.J. Barnham, I. Ballard, J.P. Connolly, N.J. Ekins-Daukes, B.G. Kluffinger, J. Nelson, C. Rohr, Quantum well solar cells, Physica E 14 (2002) 27.
- [15] M.A. Green, Third generation photovoltaics: solar cells for 2020 and beyond, Physica E 14 (2002) 65.

- [16] Green M. A. Third generation photovoltaics: Ultra-high conversion efficiency at low cost //Progress in photovoltaics: Research and Applications. – 2001. – T. 9. – №. 2. – C. 123-135.
- [17] King R. R. et al. Next-generation, high-efficiency III-V multijunction solar cells //Conference Record of the Twenty-Eighth IEEE Photovoltaic Specialists Conference-2000 (Cat. No. 00CH37036). – IEEE, 2000. – C. 998-1001.
- [18] Yamaguchi, M., Dimroth, F., Geisz, J. F., & Ekins-Daukes, N. J. (2021). Multi-junction solar cells paving the way for super high-efficiency. *Journal of Applied Physics*, 129(24).
- [19] White T. P., Lal N. N., Catchpole K. R. Tandem solar cells based on high-efficiency c-Si bottom cells: top cell requirements for > 30% efficiency //IEEE Journal of Photovoltaics. – 2013. – T. 4. – №. 1. – C. 208-214.
- [20] Adams J. G. J. et al. Higher limiting efficiencies for nanostructured solar cells //Physics and Simulation of Optoelectronic Devices XVIII. – SPIE, 2010. – T. 7597. – C. 35-43.
- [21] Browne B. et al. Triple-junction quantum-well solar cells in commercial production //AIP Conference Proceedings. – American Institute of Physics, 2013. – T. 1556. – №. 1. – C. 3-5.
- [22] Welser R. E. Thick-well quantum-structured solar cells: design criteria for nano-enhanced absorbers //Physics, Simulation, and Photonic Engineering of Photovoltaic Devices II. – SPIE, 2013. – T. 8620. – C. 291-300.
- [23] H. Fujii, K. Toprasertpong, Y. Wang, K. Watanabe, M. Sugiyama, Y. Nakano, 100-period, 1.23-eV bandgap InGaAs/GaAsP quantum wells for high-efficiency GaAs solar cells: toward current-matched Ge-based tandem cells, *Prog. Photovoltaics Res. Appl.* 22 (2014) 784.
- [24] O. Jani, C. Honsberg, Absorption and transport via tunneling in quantum-well solar cells, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 90 (2006) 3464.
- [25] Toprasertpong K. et al. Carrier escape time and temperature-dependent carrier collection efficiency of tunneling-enhanced multiple quantum well solar cells //IEEE Journal of Photovoltaics. – 2013. – T. 4. – №. 2. – C. 607-613.
- [26] Tsai C. Y., Tsai C. Y. Effects of carrier escape and capture processes on quantum well solar cells: a theoretical investigation //IET optoelectronics. – 2009. – T. 3. – №. 6. – C. 300-304.
- [27] G.F. Brown, J. Wu, Third generation photovoltaics, *Laser Photon. Rev.* 3 (2009) 394.

- [28] Bett A. W. et al. Overview about technology perspectives for high efficiency solar cells for space and terrestrial applications //28th European photovoltaic solar energy conference and exhibition. – 2013. – C. 1-6.
- [29] Yamaguchi M. High-efficiency GaAs-based solar cells //Post-Transition Metals. – 2020.
- [30] Mazzer M. et al. Progress in quantum well solar cells //Thin Solid Films. – 2006. – T. 511. – C. 76-83.
- [31] Sayed I., Bedair S. M. Quantum well solar cells: principles, recent progress, and potential //IEEE Journal of Photovoltaics. – 2019. – T. 9. – №. 2. – C. 402-423.
- [32] Ionova E. A. et al. Solar radiation concentrators paired with multijunction photoelectric converters in ground-based solar power plants (Part II) //Technical Physics. – 2017. – T. 62. – C. 589-597.
- [33] Moon R. L. et al. Multigap solar cell requirements and the performance of AlGaAs and Si cells in concentrated sunlight //13th Photovoltaic specialists conference. – 1978. – C. 859-867.
- [34] Bedair S. M., Lamorte M. F., Hauser J. R. A two-junction cascade solar-cell structure //Applied Physics Letters. – 1979. – T. 34. – №. 1. – C. 38-39.
- [35] Bertness K. A. et al. 29.5%-efficient GaInP/GaAs tandem solar cells //Applied Physics Letters. – 1994. – T. 65. – №. 8. – C. 989-991.
- [36] García I. et al. A 32.6% efficient lattice-matched dual-junction solar cell working at 1000 suns //Applied Physics Letters. – 2009. – T. 94. – №. 5.
- [37] King R. R. et al. High-efficiency space and terrestrial multijunction solar cells through bandgap control in cell structures //Conference Record of the Twenty-Ninth IEEE Photovoltaic Specialists Conference, 2002. – IEEE, 2002. – C. 776-781.
- [38] Gee J. M., Virshup G. F. A 31%-efficient GaAs/silicon mechanically stacked, multijunction concentrator solar cell //Conference Record of the Twentieth IEEE Photovoltaic Specialists Conference. – IEEE, 1996. – C. 754-758.
- [39] Jani O., Honsberg C. Absorption and transport via tunneling in quantum-well solar cells //Solar energy materials and solar cells. – 2006. – T. 90. – №. 18-19. – C. 3464-3470.
- [40] Anderson N. G. On quantum well solar cell efficiencies //Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. – 2002. – T. 14. – №. 1-2. – C. 126-131.
- [41] Connolly, J. P., Ballard, I. M., Barnham, K. W. J., Bushnell, D. B., Tibbits, T. N. D., & Roberts, J. S. (2010). Efficiency limits of quantum well solar cells.

- [42] U. Aeberhard, A Microscopic Theory of Quantum Well Photovoltaics, PhD Thesis, ETH Zuerich, 2008.
- [43] Aeberhard U. Theory and simulation of quantum photovoltaic devices based on the non-equilibrium Green's function formalism //Journal of computational electronics. – 2011. – T. 10. – C. 394-413.
- [44] Aeberhard U. Theory and simulation of photogeneration and transport in Si-SiO<sub>x</sub> superlattice absorbers //Nanoscale research letters. – 2011. – T. 6. – C. 1-10.
- [45] Aeberhard U. Quantum-kinetic perspective on photovoltaic device operation in nanostructure-based solar cells //Journal of Materials Research. – 2018. – T. 33. – №. 4. – C. 373-386.
- [46] Aeberhard U. Quantum-kinetic theory of defect-mediated recombination in nanostructure-based photovoltaic devices //MRS Online Proceedings Library. – 2012. – T. 1493. – C. 184-189.
- [47] Aeberhard U. Impact of built-in fields and contact configuration on the characteristics of ultra-thin GaAs solar cells //Applied Physics Letters. – 2016. – T. 109. – №. 3.
- [48] Aeberhard U., Gonzalo A., Ulloa J. M. Photocarrier extraction in GaAsSb/GaAsN type-II QW superlattice solar cells //Applied Physics Letters. – 2018. – T. 112. – №. 21.
- [49] Bradshaw G. K. et al. Carrier transport and improved collection in thin-barrier InGaAs/GaAsP strained quantum well solar cells //IEEE Journal of Photovoltaics. – 2012. – T. 3. – №. 1. – C. 278-283.
- [50] Kotamraju S., Sukeerthi M., Puthanveetil S. E. Modeling of InGaP/InGaAs-GaAsP/Ge multiple quantum well solar cell to improve efficiency for space applications //Solar Energy. – 2019. – T. 186. – c. 328-334.
- [51] Bastard, G., Mendez, E. E., Chang, L. L., & Esaki, L. (1982). Exciton binding energy in quantum wells. Physical Review B, 26(4), 1974.
- [52] Frenkel J. On the transformation of light into heat in solids. I //Physical Review. – 1931. – T. 37. – №. 1. – C. 17.
- [53] Frenkel J. On the transformation of light into heat in solids. II //Physical Review. – 1931. – T. 37. – №. 10. – C. 1276.
- [54] Wannier G. H. The structure of electronic excitation levels in insulating crystals //Physical Review. – 1937. – T. 52. – №. 3. – C. 191.
- [55] Mott N. F. On the absorption of light by crystals //Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences. – 1938. – T. 167. – №. 930. – C. 384-391.

- [56] Келдыш Л. В., Козлов А. Н. Коллективные свойства экситонов в полупроводниках //Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1968. – Т. 54. – №. 3. – С. 978-993.
- [57] Келдыш Л. В. Кулоновское взаимодействие в тонких пленках полупроводников и полуметаллов //Письма в ЖЭТФ. – 1979. – Т. 29. – №. 11. – С. 716-719. (выведено аналитическое уравнение для энергии связи экситона).
- [58] Miller, R. C., Kleinman, D. A., Tsang, W. T., & Gossard, A. C. (1981). Observation of the excited level of excitons in GaAs quantum wells. *Physical Review B*, 24(2), 1134.
- [59] Khrantsov, E. S., Belov, P. A., Grigoryev, P. S., Ignatiev, I. V., Verbin, S. Y., Efimov, Y. P., ... & Yakovlev, S. L. (2016). Radiative decay rate of excitons in square quantum wells: Microscopic modeling and experiment. *Journal of applied physics*, 119(18).
- [60] Voliotis, V., Grousseau, R., Lavallard, P., & Planel, R. (1995). Binding energies and oscillator strengths of excitons in thin GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As quantum wells. *Physical Review B*, 52(15), 10725.
- [61] Astakhov, G. V., Yakovlev, D. R., Kochereshko, V. P., Ossau, W., Faschinger, W., Puls, J., ... & Waag, A. (2002). Binding energy of charged excitons in ZnSe-based quantum wells. *Physical Review B*, 65(16), 165335.
- [62] Grigoryev, P. S., Kurdyubov, A. S., Kuznetsova, M. S., Ignatiev, I. V., Efimov, Y. P., Eliseev, S. A., ... & Shapochkin, P. Y. (2016). Excitons in asymmetric quantum wells. *Superlattices and Microstructures*, 97, 452-462.
- [63] Shuvayev, V. A., Deych, L. I., Ponomarev, I. V., & Lisyansky, A. A. (2006). Self-consistent Hartree method for calculations of exciton binding energy in quantum wells. *Superlattices and Microstructures*, 40(2), 77-92.
- [64] Gerlach, B., Wüsthoff, J., Dzero, M. O., & Smondyrev, M. A. (1998). Exciton binding energy in a quantum well. *Physical Review B*, 58(16), 10568.
- [65] Kumagai, M., & Takagahara, T. (1989). Excitonic and nonlinear-optical properties of dielectric quantum-well structures. *Physical Review B*, 40(18), 12359.
- [66] Peter, A. J., & Lee, C. W. (2011). Binding energy and radiative lifetime of an exciton in a type-II quantum well. *Physica Scripta*, 85(1), 015704.
- [67] Ponomarev, I. V., Deych, L. I., Shuvayev, V. A., & Lisyansky, A. A. (2005). Self-consistent approach for calculations of exciton binding energy in quantum wells. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 25(4), 539-553.

- [68] Lee, Y. C., Mei, W. N., & Liu, K. C. (1982). A novel perturbative-variational approach and its application to the impurity states in anisotropic crystals. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 15(14), L469.
- [69] Sivalertporn, K., Mouchliadis, L., Ivanov, A. L., Philp, R., & Muljarov, E. A. (2012). Direct and indirect excitons in semiconductor coupled quantum wells in an applied electric field. *Physical Review B*, 85(4), 045207.
- [70] Hilton, C. P., Hagston, W. E., & Nicholls, J. E. (1992). Variational methods for calculating exciton binding energies in quantum well structures. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 25(8), 2395.
- [71] Botti, S., Vast, N., Reining, L., Olevano, V., & Andreani, L. C. (2004). Ab initio and semiempirical dielectric response of superlattices. *Physical Review B*, 70(4), 045301.
- [72] Khramtsov, E. S., Belov, P. A., Grigoryev, P. S., Ignatiev, I. V., Verbin, S. Y., Efimov, Y. P., ... & Yakovlev, S. L. (2016). Radiative decay rate of excitons in square quantum wells: Microscopic modeling and experiment. *Journal of applied physics*, 119(18).
- [73] Yücel, M. B., Sari, H., Duque, C. M., Duque, C. A., & Kasapoglu, E. (2022). Theoretical study of the exciton binding energy and exciton absorption in different hyperbolic-type quantum wells under applied electric, magnetic, and intense laser fields. *International Journal of Molecular Sciences*, 23(19), 11429.
- [74] Khramtsov E. S. et al. Theoretical modeling of exciton-light coupling in quantum wells //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2016. – T. 690. – №. 1. – C. 012018.
- [75] Belov, P. A., & Khramtsov, E. S. (2017, March). The binding energy of excitons in narrow quantum wells. In *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 816, No. 1, p. 012018). IOP Publishing.
- [76] Belov P. A. et al. Numerical study of the exciton-light coupling in quantum wells //2017 Progress In Electromagnetics Research Symposium-Spring (PIERS). – IEEE, 2017. – C. 258-262.
- [77] G. Bastard, *Wave Mechanics for Applied to Semiconductor Heterostructures*, Les Ulis, 1998.
- [78] Vurgaftman, I., Meyer, J. Á., & Ram-Mohan, L. R. (2001). Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. *Journal of applied physics*, 89(11), 5815-5875.

- [79] Glinskii, G. F., & Mironova, M. S. (2014). Effective Hamiltonians for heterostructures based on direct-gap III–V semiconductors. The  $kp$  perturbation theory and the method of invariants. *Semiconductors*, 48, 1324-1334.
- [80]. S.L. Wolf, *Principles of Electron Tunneling Spectroscopy* (Oxford University Press, New York, 1983).
- [81]. A. Wacker and A.-P. Jauho, Quantum transport: The link between standard approaches in superlattices, *Phys. Rev. Lett.* 80, 369 (1998).
- [82]. S.Q. Murphy, J.P. Eisenstein, L.N. Pfeiffer, and K.W. West, Lifetime of two-dimensional electrons measured by tunneling spectroscopy, *Phys. Rev. B* 52, 14825 (1995).
- [83]. A. Wacker, in *Theory of Transport Properties of Semiconductor Nanostructures*, ed. by E. Schöll, Chapman and Hall, London (1998), p.321
- [84]. A. Wacker and A.-P. Jauho, Microscopic modelling of perpendicular electronic transport in doped multiple quantum wells, *Phys. Scripta* 69, 321 (1997).
- [85]. А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Добросвет, Москва (1988).
- [86]. Р.Ф. Казаринов и Р.А. Сурис, К теории электрических и электромагнитных свойств полупроводников со сверхрешеткой, *ФТП* 6, 148(1972).
- [89] Luttinger J. M. Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors: General theory // *Physical review*. – 1956. – Т. 102. – №. 4. – С. 1030.
- [90] Гуревич С. А., Закгейм Д. А., Соловьев С. А. Поляризационная анизотропия оптических межзонных переходов в напряженных InGaAs/GaAs квантовых нитях // *Физика и техника полупроводников*. – 1997. – Т. 31. – №. 5. – С. 600-605.
- [91] Рындин Е. А., Куликова И. В., Лысенко И. Е. *Основы численных методов: теория и практика* // Таганрог: Южный федеральный университет. – 2015.