

ДЕГРАДАЦІЯ КВАНТОВИХ ЯМ ТА ЗМІНА ЕНЕРГЕТИЧНИХ СПЕКТРІВ У НАПІВПРОВІДНИКАХ ПІД ДІЄЮ ОПРОМІНЕННЯ

Г. В. Верцімаха, В. В. Михайловський, В. Й. Сугаков

Інститут ядерних досліджень НАН України, Київ

Досліджено вплив опромінення високоенергетичними частинками на просторовий розподіл концентрації атомів у багатокомпонентних напівпровідниках із квантовими ямами. Розрахунки виконано для розподілу концентрації марганцю в CdMnTe . Початковий розподіл марганцю був заданий такий, який має місце у квантовій ямі $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}/\text{CdTe}$, подальша динаміка розраховувалася за допомогою кінетичних рівнянь. У рівняннях було враховано процеси радіаційного утворення дефектів, їхній вихід на поверхню та процеси рекомбінації дефектів, а також дифузію марганцю та кадмію мізвузельним та вакансійним механізмами. Показано, що опромінення призводить до перемішування компонентів багатокомпонентних сплавів та до розпливання квантової ями. Проаналізовано вплив зовнішнього опромінення на потенціал для електронів і дірок в ямі, їхні спектри та спектри екситонів у таких системах. Розраховано залежності екситонного рівня від часу опромінення при різних температурах та інтенсивностях опромінення.

Останніми десятиліттями прогрес у фізиці напівпровідникових гетероструктур дав змогу створити численні опти- та мікроелектронні прилади, в яких використовуються унікальні властивості низьковимірних систем. Використання таких приладів в умовах радіаційного опромінення обмежується ефектами деградації квантових ям, зокрема внаслідок розмиття гетеропереходів. Тому актуальним є дослідження впливу опромінення на оптичні спектри напівпровідникових гетероструктур.

Унаслідок опромінення високоенергетичними частинками може змінитися структура та взаємне розташування компонентів багатокомпонентної системи. У роботі розглядається вплив зовнішнього опромінення на потенціал електронів та дірок у квантових ямах $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}/\text{CdTe}$. Як відомо, у такій системі яма формується внаслідок неоднорідного розподілу марганцю - усередині ями марганець відсутній або його концентрація є малою (рис. 1). Даний кристал є представником напівмагнітних напівпровідників. Їхньою характерною особливістю є сильна залежність електронних спектрів від магнітного поля. Під дією опромінення форма ями змінюється внаслідок перерозподілу концентрації марганцю. У першу чергу можна очікувати зміну профілю концентрації марганцю в системі як наслідок радіаційно-прискореної дифузії. Під дією опромінення в системі утворюються пари Френкеля: вакансії та міжвузельні атоми. Вони накопичуються в зразку, дифундують, ідуть за поверхню зразка, а також можуть рекомбінувати один з одним. У роботі передбачається, що інші ефекти опромінення (утворення комплексів дефектів, дислокаційних петель тощо) є менш істотними. При збільшенні концентрації дефектів збільшується й швидкість дифузії марганцю. У результаті цього яма розпливається швидше. У цьому змісті опромінення еквівалентне збільшенню температури, тобто процесові термічного відпалу. У роботі ми

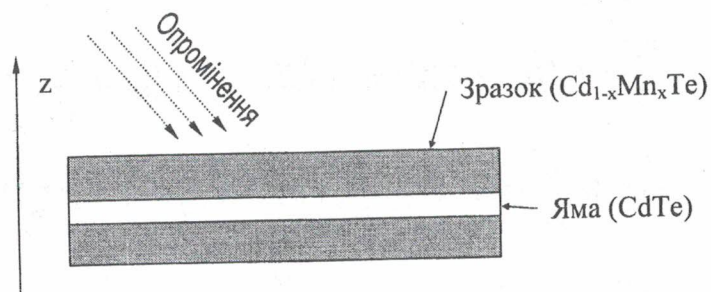


Рис. 1. Схематичне зображення системи, що розглядається.

спробували кількісно оцінити це явище. Спочатку з використанням кінетичних рівнянь знаходиться розподіл концентрації атомів, потім проведено квантово-механічні розрахунки екситонних спектрів у квантових ямах, деформованих опроміненням.

Зміна профілю концентрації марганцю під дією опромінення

Запишемо кінетичні рівняння для концентрації кадмію, марганцю, вакансій, а також для концентрацій міжвузельних атомів. Для пучків опромінення з широким профілем зміна концентрацій має місце лише вздовж напрямку z , розподіл в інших напрямках вважається однорідним.

Позначимо змінними Cd та Mn концентрації атомів кадмію та марганцю відповідно; V , I^{Cd} и I^{Mn} - концентрації вакансій та міжвузельних атомів. Утворенням різноманітних точкових дефектів у підгратці телуру, а також атомами телуру в міжвузельному положенні та в підгратці кадмію знехтуємо.

Уведемо безрозмірні змінні довжини та концентрацій: $a_0 = 0,648$ нм - постійна ґратки CdTe. Звідси отримуємо одиницю концентрації $N_0 = 3,67 \cdot 10^{21}$ см⁻³; при цьому сумарна концентрація атомів кадмію та марганцю в обраних одиницях об'єму дорівнює одиниці.

Концентрації дефектів покладемо дискретними функціями просторової координати z . Величиною Mn_i позначимо концентрацію марганцю в шарі з координатою z_i (для решти типів дефектів - аналогічно). Тоді кінетичні рівняння для концентрацій точкових дефектів записуються так:

$$\begin{aligned} \frac{\partial V_i}{\partial t} &= K_{Cd}^{rad} Cd_i + K_{Mn}^{rad} Mn_i + K_{VMn}^{dif} \cdot (V_{i+1} Mn_i + V_{i-1} Mn_i - V_i Mn_{i+1} - V_i Mn_{i-1}) + \\ &+ K_{VCd}^{dif} \cdot (V_{i+1} Cd_i + V_{i-1} Cd_i - V_i Cd_{i+1} - V_i Cd_{i-1}) - K_{Cd}^{rec} I_i^{Cd} V_i - K_{Mn}^{rec} I_i^{Mn} V_i, \\ \frac{\partial Mn_i}{\partial t} &= -K_{Mn}^{rad} Mn_i + K_{VMn}^{dif} \cdot (V_i Mn_{i+1} + V_i Mn_{i-1} - V_{i+1} Mn_i - V_{i-1} Mn_i) + K_{Mn}^{rec} I_i^{Mn} V_i, \\ \frac{\partial Cd_i}{\partial t} &= -K_{Cd}^{rad} Cd_i + K_{VCd}^{dif} \cdot (V_i Cd_{i+1} + V_i Cd_{i-1} - V_{i+1} Cd_i - V_{i-1} Cd_i) + K_{Cd}^{rec} I_i^{Cd} V_i, \\ \frac{\partial I_i^{Mn}}{\partial t} &= K_{Mn}^{rad} Mn_i + K_{IMn}^{dif} \cdot (I_{i+1}^{Mn} + I_{i-1}^{Mn} - 2I_i^{Mn}) - K_{Mn}^{rec} I_i^{Mn} V_i, \\ \frac{\partial I_i^{Cd}}{\partial t} &= K_{Cd}^{rad} Cd_i + K_{ICd}^{dif} \cdot (I_{i+1}^{Cd} + I_{i-1}^{Cd} - 2I_i^{Cd}) - K_{Cd}^{rec} I_i^{Cd} V_i. \end{aligned}$$

У цих рівняннях враховано процеси радіаційного утворення дефектів, процеси рекомбінації вакансій та міжвузлових атомів, а також дифузії кадмію та марганцю через міжвузельні положення та за допомогою вакансій. Розклавши величини Mn_{i+1} та їм подібні в ряд Тейлора та обмежившись лише другою похідною по просторовій координаті, отримуємо більш звичні рівняння дифузії.

$$\begin{aligned} \frac{\partial V}{\partial t} &= K_{Cd}^{rad} Cd + K_{Mn}^{rad} Mn + (K_{VMn}^{dif} Mn + K_{VCd}^{dif} Cd) \frac{\partial^2}{\partial z^2} V - \\ &- (K_{VMn}^{dif} \frac{\partial^2}{\partial z^2} Mn + K_{VCd}^{dif} \frac{\partial^2}{\partial z^2} Cd) V - K_{Cd}^{rec} I^{Cd} V - K_{Mn}^{rec} I^{Mn} V, \\ \frac{\partial Mn}{\partial t} &= -K_{Mn}^{rad} Mn + K_{VMn}^{dif} \cdot \left(V \frac{\partial^2}{\partial z^2} Mn - Mn \frac{\partial^2}{\partial z^2} V \right) + K_{Mn}^{rec} I^{Mn} V, \end{aligned}$$

$$\frac{\partial Cd}{\partial t} = -K_{Cd}^{rad} Cd + K_{VCd}^{dif} \cdot \left(V \frac{\partial^2}{\partial z^2} Cd - Cd \frac{\partial^2}{\partial z^2} V \right) + K_{Cd}^{rec} I^{Cd} V,$$

$$\frac{\partial I^{Mn}}{\partial t} = K_{Mn}^{rad} Mn + K_{IMn}^{dif} \frac{\partial^2}{\partial z^2} I^{Mn} - K_{Mn}^{rec} I^{Mn} V,$$

$$\frac{\partial I^{Cd}}{\partial t} = K_{Cd}^{rad} Mn + K_{ICd}^{dif} \frac{\partial^2}{\partial z^2} I^{Cd} - K_{Cd}^{rec} I^{Cd} V.$$

Звідси можна побачити фізичний зміст коефіцієнтів швидкостей реакцій. Наведемо коефіцієнти для марганцю (для кадмію - аналогічно).

K_{VMn}^{dif} визначає швидкість дифузії марганцю вакансійним механізмом: бачимо, що $K_{VMn}^{dif} V$ - це коефіцієнт дифузії марганцю, а $K_{VMn}^{dif} V_0$ - коефіцієнт дифузії марганцю при відсутності опромінення. K_{IMn}^{dif} - швидкість дифузії марганцю по міжвузельним положенням; це безпосередньо коефіцієнт дифузії. K_{Mn}^{rad} визначає швидкість утворення пар Френкеля під дією опромінення, тобто ймовірність утворення пари за одиницю часу; значення цього коефіцієнта залежить від типу опромінення, енергії та інтенсивності. K_{Mn}^{rec} визначає швидкість рекомбінації міжвузельного марганцю з вакансією; можна показати, що цей коефіцієнт пов'язаний зі швидкостями дифузії таким чином: $K_{Mn}^{rec} = 4\pi \cdot R^{rec} \cdot (K_{IMn}^{dif} + K_{VMn}^{dif})$, тут R^{rec} - радіус рекомбінації вакансії та між вузлового атому (значення в декілька постійних ґратки).

Температурну залежність коефіцієнтів, пов'язаних з дифузією, можна записати як

$$K_{VMn}^{dif} = v_{VMn} \exp\left(\frac{-E_{VMn}}{k_B T}\right).$$

Параметрами в коефіцієнтах у цій формулі є енергія активації та передекспоненційний множник. На жаль, температурну залежність коефіцієнта дифузії важко поміряти експериментально, і в літературі можна знайти значення, що відрізняються на декілька електрон-вольт в енергії активації та на декілька порядків у передекспоненційному множнику (див [1 - 4]). У цій роботі ми використали значення дифузії кадмію, які було отримано в роботі [5]. На експерименті не було помічено істотної різниці між швидкостями дифузії вакансій та міжвузлових атомів, тому для цих параметрів було обрано близькі значення.

$$E_{VCd} = 1,12 \text{ eV}, v_{VCd} = 5 \text{ см}^2/\text{с}, E_{ICd} = 1,12 \text{ eV}, v_{ICd} = 14 \text{ см}^2/\text{с}.$$

Для дифузії марганцю було взято такі самі значення (як перше наближення). Вихід точкових дефектів на поверхню кристала задається граничними умовами: $V|_{z=z_{lim}} = V_0$,

$$I^{Cd}|_{z=z_{lim}} = I^{Mn}|_{z=z_{lim}} = I_0, \text{ для марганцю та кадмію - аналогічно. Ці параметри залежать як від}$$

температури, так і від умов на границі кристала (від тиску парів кадмію, покриття тощо). Спроби розрахувати ці значення були зроблені в роботі [6], звідки ми й взяли значення. На щастя, розрахунки показують, що в кристалі під опроміненням термічні концентрації дефектів не грають істотної ролі, бо концентрація радіаційно утворених дефектів значно більша.

Результати розрахунків для різних моментів часу представлено на рис. 2. Початковий розподіл марганцю був заданий такий, який має місце у квантовій ямі $Cd_{1-x}Mn_xTe/CdTe$, подальша динаміка розраховувалася за допомогою кінетичних рівнянь. Ліворуч показано

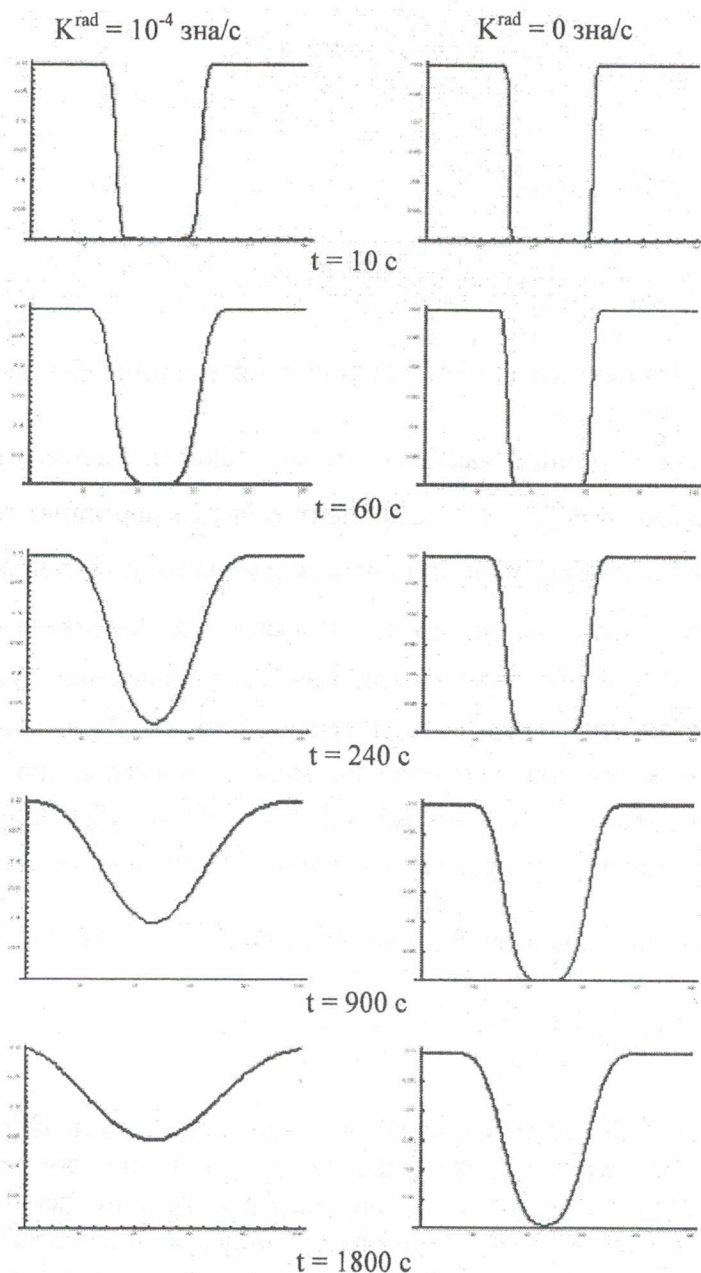


Рис. 2. Профілі концентрації марганцю у квантовій ямі під опроміненням (ліворуч) та при відсутності опромінення (праворуч). Температура зразка 300 °С.

розігріву зразка під опроміненням слід записати рівняння теплового балансу. У цьому рівнянні необхідно врахувати:

- 1) теплообмін зразка з термостатом;
- 2) розігрів зразка внаслідок опромінення;
- 3) тепло, що виділяється або поглинається при реакціях між дефектами.

Для опису теплообміну кристала з термостатом припустимо, що зразок має вигляд пластини. Потік тепла від зразка до термостата запишемо відповідно до закону Ньютона:

$$c \left(\frac{dT}{dt} \right)_0 = -\frac{2\alpha}{d} (T - T_0). \quad (1)$$

Тут c – теплоємність одиниці об'єму зразка; d – його товщина; T – температура зразка; T_0 – температура термостата (навколишнього середовища). Коефіцієнт α має назву коефіцієнта

профілі концентрацій під опроміненням інтенсивністю 10^{-4} зміцень на атом за секунду (зна/с), що відповідає типовим значенням при електронному опроміненні, праворуч - при відсутності опромінення (при однакових температурах у зразку). З графіків можна побачити, що опромінення значно пришвидшує процеси розлиття квантової ями. Ще одним цікавим результатом є факт відсутності радіаційного прискорення розмивання ями, якщо температура зразка під опроміненням є кімнатною. У цьому випадку під опроміненням відбувається накопичення точкових дефектів (вакансій та міжвузельних атомів), проте їхня дифузія майже заблокована. Якщо після припинення опромінення віддалити ці дефекти (тобто підвищити температуру, як це мало місце у досліді [7]), то ці точкові дефекти швидко рекомбінують один з одним, і профіль концентрації марганцю майже не змінюється. Тому розглянемо ефект розігріву зразка під опроміненням.

Оцінки розігріву зразка під опроміненням

Попередні розрахунки були проведені для фіксованої температури зразка. Проте внаслідок розігріву зразка опроміненням ця температура відрізняється від температури навколишнього середовища. Для кількісного опису

тепловіддачі. У даній роботі вважається, що теплоємність зразка не залежить від температури. Також нехтується залежностями коефіцієнта тепловіддачі від температури та від різниці температур зразка та термостата. Використання цих наближень можна виправдати тим, що в робочому діапазоні температур теплоємність і коефіцієнт тепловіддачі залежать від температури значно слабше, ніж швидкості термоактивованих реакцій між дефектами.

У роботі також вважається, що розподіл температури всередині зразка (а отже, і концентрації дефектів) є однорідним. У дійсності ж температура зразка більша всередині зразка і менша поблизу поверхні, яка його охолоджує. У цій роботі не розглядаються системи з неоднорідним розподілом температури, тому актуальною для нас є область навколо квантової ями, а вона доволі мала.

Для опису розігріву зразка внаслідок опромінення скористаємося такими міркуваннями: енергія, яка йде на розігрів зразка, дорівнює енергії, яка передана кристалу опроміненням, мінус енергія, яка пішла на радіаційне створення дефектів. Проте розрахунки концентрацій дефектів показують, що стаціонарні значення концентрацій точкових дефектів встановлюються набагато швидше, ніж характерні часи зміни концентрації марганцю. Тому при розгляді теплового балансу можна вважати, що енергія, яка пішла на радіаційне створення дефектів, повністю компенсується енергією, що виділяється при реакціях між дефектами. Залишається оцінити енергію, яка передана кристалу частинками опромінення.

Інтенсивність опромінення в роботі задається через коефіцієнти K_{Mn}^{rad} та K_{Cd}^{rad} , що визначають швидкість утворення пар Френкеля під дією опромінення. Зв'язок цих коефіцієнтів з енергією, що передається опроміненням у тепло, залежить від енергії та типу опромінення. Позначимо енергію, принесену в кристал опроміненням і розділену на число створених пар Френкеля, як E^{rad} . Швидкість утворення пар Френкеля в одиниці об'єму дорівнює $K^{rad} = K_{Mn}^{rad} + K_{Cd}^{rad}$. Тому сумарна енергія, передана опроміненням одиниці об'єму кристала, дорівнює $K^{rad} E^{rad}$. Таким чином, зміну температури у зразку під опроміненням можна записати як

$$c \left(\frac{dT}{dt} \right) = K^{rad} E^{rad} - \frac{2\alpha}{d} (T - T_0). \quad (2)$$

У стаціонарному стані часова похідна дорівнює нулю, тому

$$T = T_0 + \frac{d}{2\alpha} K^{rad} E^{rad}. \quad (3)$$

Значення E^{rad} (енергія, принесена в кристал опроміненням, розділена на число утворених опроміненням пар Френкеля) сильно залежить від типу опромінення та енергії частинок опромінення. У випадку, коли вся енергія опромінення йде на утворення дефектів кристалічної ґратки, величину E^{rad} можна оцінити з формули Кінчена - Піза. Відповідно до неї на кожні $2E_d$ енергії первинного вибитого атома припадає утворення однієї пари Френкеля (де E_d - енергія утворення пари Френкеля). Отже, E^{rad} треба вибрати рівною $2E_d$. Оцінки величини E_d для різних матеріалів можна знайти, наприклад, у [8]. Таке має місце при опроміненні нейтронами або зарядженими частинками не дуже великих енергій (див. [9], наприклад).

Проте необхідно врахувати й іонізаційні втрати, тобто енергію, яка передається на збудження електронної підсистеми речовини. Це призводить до додаткового розігріву кристала, але не призводить до утворення точкових дефектів. У цьому випадку величину E^{rad} треба збільшити:

$$E^{rad} = \frac{2E_d}{\gamma}, \quad (4)$$

де E_d - енергія утворення пари Френкеля, а величина γ задає, яка частина енергії опромінення йде на утворення точкових дефектів. У граничному випадку при опроміненні зарядженими частинками великих енергій величина γ досягає значення $1/4000$ [10]. Розрахунки показують, що в цьому випадку дія опромінення полягає лише в розігріві зразка, а пришвидшення дифузії внаслідок збільшення концентрації дефектів є незначним ефектом. Відпал квантової ями внаслідок лише підвищення температури розглянуто в [11]. Для оцінок кількісних величин покладемо $\gamma = 1/10$ і $E^{rad} = 300$ еВ, що відповідає опроміненню протонами з енергією біля 10 кеВ.

Тепер зробимо оцінки коефіцієнта тепловіддачі. Існує декілька механізмів, що призводять до теплообміну зразка і термостата. Один із них – теплообмін через планківське випромінювання. Для розрахунку енергії, що випромінюється нагрітим тілом, використовується закон Стефана - Больцмана. Відповідно, коефіцієнт тепловіддачі можна записати як

$$\alpha = 4 \sigma T^3 \varepsilon. \quad (5)$$

Тут σ – постійна Стефана - Больцмана; ε – випромінювальна здатність речовини. Оцінки за допомогою формули (5) для температури 600 К дають $\alpha = 9,8 \frac{Bm}{m^2 \cdot K}$.

Крім планківського випромінювання існує теплообмін із речовиною навколишнього середовища, що стикається зі зразком. Для оцінок цього механізму передбачалося, що навколишнє середовище – повітря, і рух повітря – лише внаслідок ефекту конвекції. Оцінки, зроблені за досить громіздкими формулами із [12], показують, що значення коефіцієнта теплообміну для цього механізму лежать від 3 до $7 \frac{Bm}{m^2 \cdot K}$ залежно від температури, різниці температур зразка та термостата, а також орієнтації зразка. З огляду на обидва ці механізми в роботі було використано значення $\alpha = 15 \frac{Bm}{m^2 \cdot K}$. Слід зазначити, що якщо присутня система вентилявання або течія повітря не конвективна, то коефіцієнт теплообміну може бути більшим. Товщину пластинки d було вибрано рівною 300 нм. Відповідно, у використаних у роботі одиницях, величина $2\alpha/d$ дорівнює $10^{-5} \frac{eB}{K}$.

Обравши такі значення величин, одержуємо, що при інтенсивності опромінення $K^{rad} = 10^{-5}$ зна/с температура зразка на 300 К більша за температуру навколишнього середовища. Проте величина розігріву зразка опроміненням істотно залежить від типу та енергії опромінення, геометрії зразка та способу охолодження.

Енергія екситона у квантовій ямі з дифузійно розмитим профілем

Як видно з попередніх розділів, концентраційний профіль гетероструктури істотно змінюється внаслідок опромінення. Саме концентрація домішок марганцю в шарах гетероструктури $Cd_{1-x}Mn_xTe/CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe$ визначає глибини потенціальних ям для електрона та дірки, що формують екситон. Тому спричинене опроміненням розмиття меж поділу гетероструктури приводить до зміни енергетичного профілю квантової ями, а отже, і зміни енергії екситона. У подальшому розрахуємо спектри опромінених і відпалених зразків з квантовими ямами. Для розрахунку спектра екситона використаємо традиційні підходи визначення спектрів у квантових ямах [13 - 16]. Запишемо гамільтоніан системи:

$$H = H_0 + V_e(z_e) + V_h(z_h), \quad (6)$$

де H_0 - гамільтоніан вільного екситона Ванье в кристалі без домішок; $V_e(z_e)$ і $V_h(z_h)$ - потенціали квантової ями для електрона та дірки відповідно; z – напрям росту кристала. Потенціальний профіль для носіїв заряду визначається розподілом домішок марганцю $x(z)$ у структурі. Згідно з відомими емпіричними залежностями залежність ширини забороненої зони структури кристала $Cd_{1-x}Mn_xTe$ від концентрації іонів марганцю має

вигляд $E_g(z) = E_g^{CdTe} + x(z) dE_g$, де $E_g^{CdTe} = 1,606$ еВ - ширина забороненої зони CdTe при температурі $T = 2$ К, $dE_g = 1,592$ еВ. Таким чином, розглядаємо задачу про кулонівську взаємодію електрона та дірки, локалізованих у потенціальних ямах $V_e(z_e) = (1 - \alpha)x(z) dE_g$ та $V_h(z_h) = \alpha x(z_h) dE_g$ відповідно, де $\alpha = 0,4$.

Розподіл домішок марганцю $x(z)$ визначається з даних, отриманих у попередньому розділі. Розрахунки проводилися для випадку відпалених зразків. У цьому разі утворені опроміненням вакансії та міжвузельні атоми відсутні внаслідок процесів взаємної рекомбінації, тому їхнім вплив на спектр можна знехтувати. Профіль домішок апроксимувався функцією

$$x(z) = C_0 + C_1 \left(\operatorname{erfc} \left(\frac{z - B_1}{A_1} \right) + \operatorname{erfc} \left(-\frac{z - B_2}{A_2} \right) \right), \quad (7)$$

параметри A , B та C підбиралися для максимального збігу кривої з результатами чисельного розрахунку концентрації марганцю. Такий вигляд апроксимуючої функції обрано тому, що за відсутності рекомбінації та при постійному коефіцієнті дифузії у такому вигляді записується точний розв'язок рівняння дифузії в суцільному середовищі при початкових умовах, що розглядаються в роботі.

Для розрахунків енергії зв'язку використовувався варіаційний метод з пробною хвильовою функцією основного стану екситона

$$\Phi(\vec{r}, z_e, z_h) = N f_e(z_e) f_h(z_h) e^{-r/\lambda}, \quad (8)$$

де $\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_h$, $\vec{r}_{e(h)}$ - координата електрона (дірки); λ - варіаційний параметр; N - стала нормування. Для розрахунку одночастинкових хвильових функцій електрона та дірки $f_e(z_e)$ та $f_h(z_h)$ у квантових ямах чисельно розв'язувалось рівняння

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_{e(h)}} \frac{d^2}{dz_{e(h)}^2} + V_{e(h)}(z_{e(h)}) \right) f_{e(h)}(z_{e(h)}) = E_{e(h)} f_{e(h)}(z_{e(h)}), \quad (9)$$

де $m_{e(h)}$ - ефективна маса електрона (важкої дірки); $E_{e(h)}$ - енергія електрона (дірки) у квантовій ямі.

При цьому для розрахунку енергії екситона у пробній хвильовій функції (8) враховувались лише хвильові функції найнижчих рівнів електрона та дірки у квантових ямах. Це наближення справедливе, якщо відстань між рівнями електрона (дірки) значно перевищує енергію зв'язку екситона. Для розрахунків використовувались ефективні маси електрона та важкої дірки $m_e = 0,096m_0$ та $m_h = 0,64m_0$ відповідно, діелектрична стала $\epsilon = 9,7$.

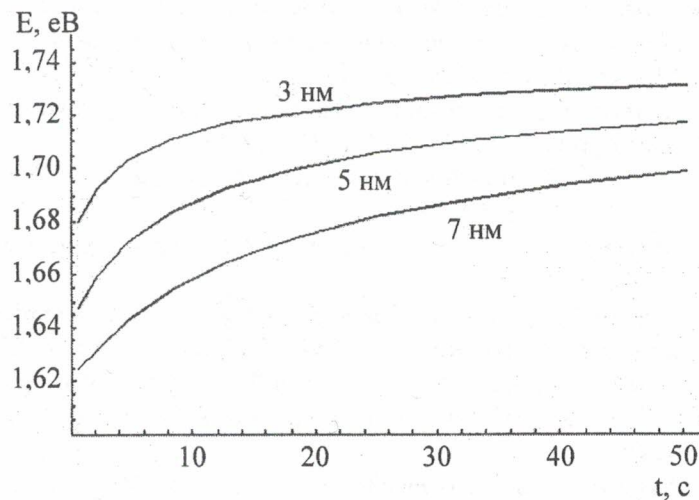


Рис. 3. Зміна енергії екситона з часом для квантових ям різної ширини. Параметри опромінення такі, як на рис. 2.

Розраховану залежність енергії екситона від часу наведено на рис. 3 для кількох значень ширини ями. Видно, що з плином часу енергія екситона в ямі збільшується. Якій це зрозуміло з таких міркувань. У нерозмитій прямокутній квантовій ямі заданої глибини енергія екситона тим більша, чим вужча яма. Як видно з рис. 2, з ростом параметра розмиття потенціальна яма звужується в області нижчих енергій, що врешті приводить до зменшення глибини ями. Це звуження ями приводить до зростання енергії екситона як цілого з ростом параметра розмиття. У той же час розширення ями в її верхній частині могло б спричинити зменшення енергії екситона при опроміненні, проте цього не відбувається, тому що найнижчий локалізований рівень як електрона, так і важкої дірки в заданому діапазоні параметрів знаходиться біля дна квантової ями, і система є більш чутливою до звуження ями саме в цій області енергій.

Таким чином, опромінення даної гетероструктури приводить до суттєвого зростання енергії екситона. Зміна енергії досягає значень десятків міліелектрон-вольт, що може істотно вплинути на оптичні спектри відбивання та люмінесценції.

Ця дослідницька робота була частково підтримана Міністерством науки та освіти України (проект № 02.07.147).

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Jamil N.Y. Shaw D.* The diffusion of Mn in CdTe // *Semicond. Sci. Technol.* - 1995. - Vol. 10. - P. 952 - 958.
2. *Barcz A., Karczewski G., Wojtowicz T., Kossut J.* Manganese diffusion in MBE-grown Cd(Mn) Te structures // *J. Crystal Growth.* - 1996. - Vol. 159. - P. 980 - 984.
3. *Makowski S., Khoi N., Golnik A. et al.* Influence of capping on manganese diffusion in CdTe/CdMnTe quantum well structures // *Solid State Communications.* - 1998. - Vol. 107, No. 6. - P. 267 - 271.
4. *Eumery J., Hartmann J. M., Baumbach G. T.* Interface dilution and morphology of CdTe/MnTe superlattices studied by small- and large-angle x-ray scattering // *J. Appl. Phys.* - 2000. - Vol. 87, No. 10. - P. 7266 - 7274.
5. *Grill R., Turjanska L., Franc J. et al.* Chemical Self-Diffusion in CdTe // *phys. stat. sol. (b).* - 2002. - Vol. 229, No. 1. - P. 161 - 164.
6. *Berding M. A.* Native defects in CdTe // *Phys Rev B.* - 1999. - Vol. 60, No. 12. - P. 8943 - 8950.
7. *Bacher G., Kummell T., Eisert D. et al.* Buried single CdTe/CdMnTe quantum dots realized by focused ion beam lithography // *Appl. Phys. Lett.* - 1999. - Vol. 75, No. 7. - P. 956 - 958.
8. *Бургуэн Ж., Ланно М.* Точечные дефекты в полупроводниках. - М.: Мир, 1985. - 304 с.
9. *Лейман К.* Взаимодействие излучения с твердым телом и образование элементарных дефектов. - М.: Атомиздат, 1979. - 296 с.
10. *Денисов С.П.* Ионизационные потери энергии заряженных частиц // *Соросовский образовательный журнал.* - 1999. - № 11. - С. 90 - 96.
11. *Harrison P., Hagston W.E., Stirner T.* Excitons in diffused quantum wells // *Phys. Rev. B.* - 1993. - Vol. 47. - P. 16404 - 16409.
12. *Мартыненко О.Г., Соковишин Ю.А.* Свободно-конвективный теплообмен. - Минск: Наука и техника, 1982. - 400 с.
13. *Greene R., Bajaj K.K., Phelps E.* Energy levels of Wannier excitons in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs quantum-well structures // *Phys. Rev. B.* - 1984. - Vol. 29. - P. 1807 - 1812.
14. *Kuhr-Heinrich B., Popp M., Ossau W. et al.* Magneto-optical study of heavy- and light-hole excitons in CdTe/(Cd,Mn)Te single quantum wells // *Semicond. Sci. Technol.* - 1993. - Vol. 8, No.7. - P. 1239 - 1246.
15. *Sugakov V.I., Vertsimakha A.V.* Effect of Magnetic Impurity Concentration and Spin Projection Fluctuations on Exciton Spectra in Diluted Magnetic Semiconductor Quantum Wells // *Phys. Stat. Sol. (b).* - 1998. - Vol. 209, No. 1. - P. 49 - 54.
16. *Brubach J., Silov A.Yu., Haverkort J.E. et al.* Carrier capture in ultrathin InAs/GaAs quantum wells // *Phys. Rev. B.* - 2000. - Vol. 61. - P. 16833 - 16840.

**ДЕГРАДАЦІЯ КВАНТОВИХ ЯМ І ЗМІНЕННЯ ЕНЕРГЕТИЧЕСКИХ СПЕКТРОВ
В ПОЛУПРОВІДНИКАХ ПІД ДІЄВІМ ОБЛУЧЕННЯ****А. В. Верцимаха, В. В. Михайловский, В. И. Сугаков**

Рассмотрено влияние облучения высокоэнергетическими частицами на пространственное распределение концентрации атомов в многокомпонентных полупроводниках с квантовыми ямами. Расчеты выполнены для распределения концентрации марганца в CdMnTe. Начальное распределение задавалось таким, какое имеет место в квантовой яме Cd_{1-x}Mn_xTe/CdTe, дальнейшая динамика рассчитывалась с помощью кинетических уравнений. В уравнениях учтены процессы радиационного образования дефектов, их уход на поверхность и процессы рекомбинации дефектов, а также диффузия марганца и кадмия межузельным и вакансионным механизмами. Показано, что облучение приводит к перемешиванию компонент многокомпонентных сплавов и к расплыванию квантовой ямы. Проанализировано влияние внешнего облучения на потенциал для электронов и дырок, на их спектры и на спектры экситонов в таких системах. Рассчитаны зависимости экситонного уровня от времени при разных температурах и интенсивностях облучения.

**QUANTUM WELLS DEGRADATION AND MODIFICATION OF ENERGY SPECTRA
IN SEMICONDUCTORS UNDER IRRADIATION****G. V. Vertsimakha, V. V. Mykhaylovskyy, V. Y. Sugakov**

The influence of high-energy particles radiation on the spatial distribution of atom concentration in multicomponent semiconductors with quantum wells was considered. The calculations was made for manganese concentration in CdMnTe. The initial distribution of manganese concentration was taken as in Cd_{1-x}Mn_xTe/CdTe quantum well. Further dynamics was simulated with kinetic equations. Defect creations by irradiation, their recombination and drift to surface as well as manganese diffusion with vacancies and interstitials were taken into account in the kinetic equations. It was shown that irradiation causes the intermixing of compound's components and the quantum well spreading. The influence of external irradiation on the potential for electrons and holes, their spectra and exciton spectra was analyzed. Time dependences of exciton level were calculated for different temperatures and irradiation intensity.

Надійшла до редакції 27.12.04,
після доопрацювання – 29.03.05.