

ОРИГИНАЛНИ НАУЧНИ ЧЛАНЦИ
ORIGINAL SCIENTIFIC PAPERS
ОРИГИНАЛЬНЫЕ НАУЧНЫЕ СТАТЬИ

НАНОУРОВНЕВЫЙ АНАЛИЗ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ ГЕНЕРАТОРОВ ТИПА A^3B^5

Леонид И. Гречихин
Белорусская государственная академия авиации,
Минск, Республика Беларусь
e-mail: gretchihin@yandex.ru

DOI: 10.5937/vojtehg63-7180

ОБЛАСТЬ: электроника, материалы (полупроводниковые квантовые генераторы)
ВИД СТАТЬИ: оригинальная научная статья
ЯЗЫК СТАТЬИ: русский

Краткое содержание:

Обосновано образование кластерной решеточной структуры полупроводниковых кристаллов типа A^3B^5 . Показано, каким образом происходит деформация электронных оболочек атомов составных элементов полупроводниковой кристаллической структуры. На примере кристаллов из соединений индия с элементами пятой группы таблицы Менделеева установлено, между какими энергетическими уровнями реализуется генерация полупроводникового квантового генератора. Сформулированы требования к технологии изготовления лазеров на основе A^3B^5 .

Ключевые слова: полупроводниковый лазер, нанокластерный уровень, генерация.

Введение

Полупроводниковые лазеры широко используются в науке, технике, медицине, связи и др. Такое широкое применение обусловлено следующими их положительными качествами:

1 – компактность, обусловленная большим коэффициентом усиления 10^4 и более;

2 – коэффициент полезного действия 40% и более;

3 – широкий диапазон генерируемых излучений от ближнего ультрафиолетового до далекого инфракрасного диапазона;

4 – малая инерционность, позволяющая получать быстро изменяющуюся перестройку частоты генерации;

5 – многими способами может быть реализована инверсная заселенность: оптическая, электронная, электрическими и магнитными полями;

6 – сама кристаллическая матрица полупроводника является активным веществом, а не примеси в основном кристалле, как в твердотельных лазерах.

Необычные свойства полупроводниковых лазеров ставят следующую **цель**: рассмотреть, как формируются кристаллические полупроводниковые структуры, на основе которых реализованы и могут быть реализованы квантовые генераторы, и рассмотреть это на наноуровне, обосновав энергетическую структуру такого состояния, и выяснить с каких энергетических термов осуществляется переход, который определяет генерацию ОКГ на примере кристаллов типа A^3B^5 .

Поставленная цель может быть достигнута путем решения следующих **задач**:

1. Обосновать образование кластерной решеточной структуры полупроводникового кристалла.

2. Какие происходят деформации электронных оболочек составных элементов полупроводниковой кристаллической структуры?

3. Выяснить между какими энергетическими уровнями двухатомных молекул реализуется генерация полупроводникового оптического квантового генератора.

Решение поставленных задач осуществлено путем применения двухчастичной квантовой механики, которая разработана в работах (Гречихин, и др. 2010, стр.6-33), (Гречихин, 2004, стр.77-108), (Гречихин, 2008, стр.17-46).

Энергия связи двухатомных молекул

Непосредственный обмен валентными электронами между взаимодействующими частицами создает энергию связи в динамике. Для одноэлектронной задачи метод решения был предложен Шредингером, а для многоэлектронной системы этот метод разработан в (Гречихин, 2004, стр.77-108), (Гречихин, 2008, стр.17-46), Фок, 2008, стр.376) и представлен в обобщенном виде:

$$E_{св.рез} = \begin{cases} -\frac{2E_{св,0}r_e^6}{r^6} + \frac{E_{св,0}r_e^{12}}{r^{12}}, & \text{при } r \leq r_e; \\ \sum_{i=1}^3 N_i \kappa_i^2 \left[\sum_{k=0}^3 \sum_{l=0}^3 Z_{a,k}^* Z_{b,l}^* \int \int_{(a)(b)} \rho_{e,a}(\varepsilon_k) \rho_{e,l}(\varepsilon_l) \left(\frac{H_{1,1} + H_{1,2}}{1+S} \right) d\varepsilon_k d\varepsilon_l \right] & \text{при } r > r_e. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь r_e – равновесное расстояние между взаимодействующими частицами; N_i – число частиц в i -й координационной сфере; κ_i – коэффициент видности; $Z_{a,k}^*, Z_{b,l}^*$ – эффективные заряды взаимодействующих частиц; $\rho_{e,a}(\varepsilon_k), \rho_{e,b}(\varepsilon_l)$ – распределение электронной плотности вокруг силовых центров взаимодействующих частиц в k -ом и l -ом энергосостояниях; $H_{1,1}, H_{1,2}$ и S – соответственно интегралы кулоновский, обменный и перекрытия.

В потенциале взаимодействия (1) на расстояниях меньше равновесного применяется эмпирический потенциал Леннарда-Джонса, который достаточно удовлетворительно описывает межатомные взаимодействия, а применительно к молекулярным системам наиболее целесообразно использовать аппроксимацию Морза:

$$U(r) = D_e \left[1 - \exp(-\beta(r - r_0)^2) \right] - D_e. \quad (2)$$

Здесь $\beta = 2\pi\nu_e \sqrt{\frac{M}{2D_e}}$; и в свою очередь основная частота

$\nu_e = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{M}}$ – колебания взаимодействующих молекул,

$k = \frac{|\text{grad}(U(r))|}{r - r_0}$ – коэффициент упругости, а M – приведенная масса

молекул, D_e – энергия связи бинарного взаимодействия частиц (энергия диссоциации). Потенциал (1) применяется, когда требуется получить значение энергии разрыва связи или энергии диссоциации. При этом необходимо учитывать и другие типы бинарного взаимодействия.

Ионная связь в бинарном взаимодействии сложных частиц

Результирующая волновая функция, описывающая ковалентную и ионную связь, представляется суперпозицией волновых функций вида (Коулсон, 1965, стр.426):

$$\Psi = \Psi_{ков} + \lambda \Psi_{ион}, \quad (3)$$

где λ – постоянная, значение которой характеризует асимметрию зарядового распределения, т.е., полярный характер связи двух взаимодействующих частиц.

В процессе обмена валентными электронами необходимо учитывать вероятность пребывания валентного электрона вблизи положительного остова каждой из частиц (P_1 и P_2), а также вероятность обмена (S) между частицами. Если валентный электрон первой частицы переходит ко второй частице, то такое событие произойдет с вероятностью $(1-P_1)S$, а валентный электрон второй частицы находится вблизи своей частицы и не переходит к первой частице обладает вероятностью $P_2(1-S)$. Результирующая совместная вероятность такого события равна $(1-P_1)S \cdot P_2(1-S)$. Аналогичная ситуация реализуется, когда валентный электрон второй частицы переходит к первой частице, а электрон первой частицы не переходит ко второй частице. Такое событие обладает вероятностью $P_1(1-S) \cdot (1-P_2)S$. Как в первом, так и во втором случаях возникает ионная связь. Общая вероятность возникновения ионной связи равна сумме этих вероятностей

$$\Theta = P_1 S \cdot P_2 (1-S) + P_1 (1-S) \cdot P_2 S. \quad (4)$$

Следовательно, при бинарном взаимодействии двух одинаковых частиц или разноименных частиц энергия ионной связи в общем виде определяется по формуле

$$E_{ион} = -[(1-P_1)P_2 + (1-P_2)P_1]S(1-S) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0}. \quad (5)$$

Наведенная энергия связи. В процессе обмена валентными электронами между взаимодействующими частицами возникает увеличенная плотность электронного облака. Это облако отстоит от первой и второй взаимодействующих частиц на величину ковалентного радиуса, уменьшенного на величину толщины электронного облака перекрытия. Тогда:

$$E_{нав.} = P_1 P_2 (1 - S)^2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{Z_{2,1}^*}{r_1} + \frac{Z_{2,2}^*}{r_2} \right]. \quad (6)$$

Здесь r_1 и r_2 – радиусы удаления первой и второй частицы от эффективного центра образовавшейся бинарной частицы.

Так как атомы в сложных молекулах и в конденсированных средах пребывают в виде положительных ионов, образуя положительно заряженный остов, то большинство ионов сложных атомарных структур обладают встроенным дипольным электрическим моментом. Наличие у взаимодействующих атомов встроенного дипольного электрического момента приводит к дополнительной энергии связи электрон-дипольного и диполь-дипольного взаимодействий. В этой связи в работах (Гречихин, и др. 2010 стр.6-33), (Гречихин, 2004, стр.77-108), (Гречихин, 2008, стр.17-46) была разработана квантово-механическая методика расчета встроенных электрических моментов сложных атомных систем.

Встроенные электрические моменты сложных атомных систем

Вследствие разных значений средних удалений электронов s - p - и d -состояний их волновые функции взаимно перекрываются и возникает гибридизация волновых функций этих состояний (Гречихин, и др. 2010 стр.6-33), (Гречихин, 2004, стр.77-108), (Гречихин, 2008, стр.17-46). Сферически симметричная функция s -состояния деформируется, что приводит к формированию встроенного дипольного электрического момента внутри сложной атомной системы. Приравнивая центростремительную силу, обусловленную законом Кулона, центробежной силе для обоих электронов с учетом их взаимного отталкивания получаем значение квадрата смещения

$$\bar{x}^2 = \frac{Z_1^* e^2}{m_e v_1^2} \cdot \frac{Z_2^*}{m_e v_2^2} \cdot \frac{r_{1,2}^2}{r_1 r_2} = \bar{r}_1 \bar{r}_2 \frac{r_{1,2}^2}{r_1 r_2}. \quad (7)$$

Полученное значение усредняется по всему объему конфигурационного пространства электронного облака первого и второго электронов, а именно

$$\bar{x}^2 = \frac{1}{4} \bar{r}_1 \bar{r}_2 (A_1 A_2)^{1/2} \iint \frac{r_{1,2}^2}{r_1 r_2} |\psi_{2s}|^2 |\psi_{2p}|^2 d\tau_1 d\tau_2. \quad (8)$$

Отсюда для единичного силового центра получаем

$$\bar{x}^2 = 384\bar{r}_1\bar{r}_2C_1^2C_2^2\alpha^4\beta^4\left(\frac{1}{\alpha^5\beta^4} + \frac{1}{\alpha^4\beta^5}\right) \quad (9)$$

где коэффициенты $C_1^2C_2^2 = \frac{1}{8}P_1P_2S$; P_1 и P_2 – вероятности пребывания взаимодействующих электронов вблизи первого и второго состояния атомной системы соответственно; \bar{r}_1 и \bar{r}_2 – средние радиусы удаления взаимодействующих электронов от ядра первого и второго энергетического состояния в атомных единицах; S – интеграл перекрытия взаимодействующих электронов.

На основании (9) с учетом принципа Паули и правила Хунда результирующий встроенный электрический момент выразится в виде следующей суммы

$$\vec{p}_\Sigma = e \sum_i \Delta\vec{r}_i, \text{ а } \Delta\vec{r}_i = \vec{x}_i - \vec{x}_0. \quad (10)$$

Значения смещения электронных оболочек от центра атома и соответствующие им электрические диполи для атомов индия, азота фосфора, мышьяка, сурьмы и висмута приведены в табл. 1.

Таблица 1 – Встроенные электрические моменты для атомов индия и атомов пятой группы таблицы Менделеева

Table 1 – Incorporated electric moments of Indium atoms and the atoms of Group 5 of the Mendeleev periodic table

Tabela 1 – Ugrađeni električni momenti atoma indijuma i atoma pete grupe Mendelejeve tablice

Элемент	Электрический момент, Кл·м*10 ³⁰					
Индий	$p-s^1$	$p-s^2$	-	-	-	$p_{\Sigma, \text{рез}}$ 5,1
	11,0	-5,9				
	d^1-s^1	d^1-s^2	d^2-s^1	d^2-s^2	d^3-s^1	$p_{\Sigma} \text{In}^+$ 7,2
	9,43	-11,27	6,07	-7,98	1,47	
	d^3-s^2	d^4-s^1	d^4-s^2	d^5-s^1	d^5-s^2	
	-2,56	0,91	-1,66	0,59	-1,12	
	d^6-s^1	d^6-s^2	d^7-s^1	d^7-s^2	d^8-s^1	
	0,41	-0,78	0,29	-0,55	0,27	
d^8-s^2	d^9-s^1	d^9-s^2	$d^{10}-s^1$	$d^{10}-s^2$		
-0,42	0,19	-0,38	0,13	-0,16		
Азот	p^1-s^1	p^1-s^2	p^2-s^1	p^2-s^2	p^3-s^1	$p_{\Sigma, \text{рез}}$ 3,41
	9,38	-7,25	18,78	-17,985	8,68	
	p^3-s^2					$p_{\Sigma, \text{рез}} \text{N}^+$ 1,76
	-7,715					

Элемент	Электрический момент, Кл·м*10 ³⁰					
	$p^1 - s^1$	$p^1 - s^2$	$p^2 - s^1$	$p^2 - s^2$	$p^3 - s^1$	$\rho_{Э,рез}$
Фосфор	11,26 $p^3 - s^2$ -10,23	-8,26	12,31	-9,55	12,93	$\rho_{Э,рез} P^+$ 8,48 5,47
Мышьяк	6,11 $p^3 - s^2$ -4,75	-4,51	6,47	-5,01	5,88	$\rho_{Э,рез} As^+$ 4,19 2,59
Сурьма	5,91 $p^3 - s^2$ -4,12	-4,26	5,95	-4,56	5,22	$\rho_{Э,рез} Sb^+$ 4,14 2,49
Висмут	5,19 $p^3 - s^2$ -3,42	-3,99	5,05	-3,92	4,30	$\rho_{Э,рез} Bi^+$ 3,22 2,01

Исходные данные, по которым производился расчет ковалентной и ионной связей приведен в табл. 2. В табл. 2 сведены данные по энергиям ионизации из справочника (Бабичев и др. 1991, стр.1232) радиусы атомных орбиталей взяты из справочника (Радциг и др., 1980, стр.240.), недостающие значения были рассчитаны по методу, предложенному Слэтером (Гречихин, 2008, стр.17-46). Эффективные заряды получены из значений энергий ионизации и радиусов основного состояния.

Электрон-дипольная связь в бинарном взаимодействии сложных частиц

Когда возникает доля ионной связи, то одна из взаимодействующих частиц несет отрицательный заряд, а другая частица обладает положительным зарядом, которые взаимодействуют со встроенными и введенными дипольными электрическими моментами. В этом случае

Таблица 2 – Исходные данные, на основании которых производился расчет
Table 2 – Initial data on which the calculation is based
Tabela 2 – Inicijalni podaci na osnovu kojih se vrši proračun

Веще-ства	Потенциал первой, второй и третьей кратности ионизации, В			Среднее удаление электрона от ядра первой, второй и третьей кратности ионизации, Å			Эффективный заряд ядра первой, второй и третьей кратности ионизации		
	Θ_1	Θ_2	Θ_3	$r_{p,1}$	$r_{p,2}$	r_s	Z_1	Z_2	Z_3
In	5,78	18,87	28,0	1,998	1,403	1,081	0,802	1,836	2,099
N	14,53	29,602	47,45	0,767	0,693	0,593	0,752	1,423	1,948
P	10,48	19,77	30,20	1,227	1,174	1,047	0,893	1,610	2,194
As	9,79	18,59	28,4	1,355	1,281	1,215	0,920	1,652	2,392
Sb	8,61	16,53	25,32	1,562	1,477	1,401	0,932	1,693	2,460
Bi	7,29	16,70	25,56	1,660	1,572	1,493	0,838	1,821	2,647

частицы могут притягиваться или отталкиваться друг от друга. Такие возможности возникают как для первой, так и для второй взаимодействующих частиц. В результате возникает электрон-дипольная связь вида

$$E_{e-d} = 2P_1P_2(1-S)S \frac{e(p_{э,2} + p_{э,1})}{4\pi\epsilon_0 r_e^2}, \quad (11)$$

где $p_{э,1}$ и $p_{э,2}$ – встроенные дипольные электрические моменты ионов взаимодействующих частиц.

В процессе обменного взаимодействия между взаимодействующими частицами отрицательный заряд dq взаимодействует с дипольным моментом, как первой, так и второй частиц ослабляя бинарную связь между частицами. Энергия такой бинарной связи равна

$$E'_{e-d} = 2 \frac{dq(p_{э,1} + p_{э,2})}{4\pi\epsilon_0 r_1^2}. \quad (12)$$

Наличие встроенных электрических моментов во взаимодействующих частицах приводит к возникновению диполь-дипольного взаимодействия, как положительного, так и отрицательного. В первом случае бинарная связь ослабляется, а во втором случае наоборот усиливается. Если диполь-дипольное взаимодействие превышает электрон-дипольное взаимодействие, то тогда встроенные диполи взаимодействующих частиц выстраиваются вдоль одного из направлений, усиливая энергию связи между частицами.

Диполь-дипольная связь в бинарном взаимодействии сложных частиц

В общем случае диполь-дипольное взаимодействие в бинарном взаимодействии определяется по формуле

$$E_{dun.-dun.} = 2 \frac{P_{э,1}P_{э,2}}{4\pi\epsilon_0 r_e^3}, \quad (13)$$

Здесь r_e – равновесное расстояние в конденсированной фазе, определяемое из плотности вещества.

Таким образом, сложное по своей конфигурации электрическое поле, формируемое диполями, приводит к тому, что следует учитывать взаимное расположение диполей друг относительно друга, которое определяется строением сложной молекулы или кристалла.

Диполь-дипольное взаимодействие в первом ближайшем слое ослабляется крутильными колебаниями электрических диполей в плоскостях XZ и YZ . Это две степени свободы, поэтому $E_{\text{дин,рез}}(1) = E_{\text{дин,0}} + k_B T$. При взаимодействии со вторым и третьим слоями добавляются еще две степени свободы, обусловленные колебаниями частиц вещества в плоскости, перпендикулярной радиусу, соединяющего взаимодействующие частицы. Тогда

$$E_{\text{дин,рез}}(2,3) = E_{\text{дин,0}} + 2k_B T. \quad (14)$$

В конденсированном состоянии на основании закона Дюлонга и Пти тепловая энергия распределена по шести степеням свободы. Поэтому в этом случае

$$E_{\text{св.,рез.}} = E_{\text{св.,0}} + 3k_B T. \quad (15)$$

Полученные энергии связи бинарного взаимодействия позволяют определять энергии диссоциации двухатомных молекул, энергию разрыва связи между разными взаимодействующими частицами, энергию бинарной связи внутри кластерных образований и энергию межкластерного взаимодействия.

Кластерное строение вещества

Кластерная модель конденсированного состояния четко определена в работах (Гречихин, 2004, стр.77-108), (Гречихин, 2008, стр.17-46). Кластеры являются микрокристаллами. Такие микрообразования ранее наблюдали в жидком состоянии, а применительно к воде их называли ассоциаты (Глинка 1983, стр.704) и наблюдали их в виде обломков льда. Твердое тело формируется кластерами. Между кластерами образуется свободное пространство, в котором находятся исходные частицы вещества, совершающие трансляционное движение между кластерами. Плотность упаковки частиц в кластере соответствует плотности упаковки кристалла (0,68 – 0,74). Плотность упаковки свободных частиц вещества в межкластерном объеме составляет 0,44 – 0,47 (Еланский, 1991, стр.160). Это экспериментальный факт, полученный с применением метода молекулярной динамики совместно с рентгеноструктурным анализом.

Взаимодействие с первой координационной сферой формирует кластер с наиболее плотной упаковкой частиц и с наибольшей энергией связи. Это основной кластер, который содержит 7 частиц в случае простой кубической структуры; 9 частиц в случае объемноцентри-

рованной структуры и 13 частиц содержится в гранецентрированной структуре. Основной кластер, взаимодействуя со свободными частицами межкластерного объема, может увеличиваться в размерах с понижением температуры. Энергия связи свободной частицы с кластером определяется энергией физической адгезии, определяемой обменом электронами второй и последующей кратностей ионизации с ближним окружением ячейки адгезии. При низких температурах свободные частицы в межкластерном объеме отсутствуют. Межкластерное взаимодействие уплотняет структуру и тогда каждая частица обладает энергией связи, которая обусловлена всеми типами взаимодействий между частицами всех трех координационных сфер.

Кластер объемоцентрированной структуры представляет собой четырехгранную бипризму, а гранецентрированная структура – трехгранную бипризму (Гречихин, 2008, стр.17-46), а их плотная упаковка создает в кристалле соответствующую структуру. По мере распада монолитного кристаллического состояния при низких температурах на отдельные кластеры энергия связи частиц второй и третьей координационных сфер существенно изменяется, но расположение частиц в структуре остается неизменным.

Количество частиц в кластере определяется следующим образом:

$$N_{\text{кл.}} = \sum_{i=1}^4 W_i N_i \quad (16)$$

где N_i – число частиц в i – той координационной сфере и W_i – вероятность того, что частица вещества связана с кластером и не находится в свободном пространстве, совершая трансляционное движение. Эта вероятность определяется с использованием функции распределения Максвелла-Больцмана.

Количество связанных частиц в кластере с ростом температуры практически падает по линейному закону, а количество свободных частиц, приходящихся на один кластер, возрастает по линейному закону (Гречихин, 2004, стр.77-108), (Гречихин, 2008, стр.17-46).

В решеточной кластерной структуре в зависимости от расположения кластеров относительно друг друга возникают межкластерные пустоты. Для ГЦК структуры - это пустоты $4,05r_0$, $3r_0$, $1,5r_0$, $0,5r_0$ и $0,3092r_0$, а для ОЦК структуры – $3,63r_0$, $1,5r_0$ и $0,4142r_0$. Пустоты $4,05r_0$, $3r_0$, и $0,3092r_0$ ГЦК структуры; $3,63r_0$ и $0,4142r_0$ ОЦК структуры имеют сфероидальную форму, а остальные пустоты – щелевидную форму и расположены хаотически друг относительно друга (Гречи-

хин, 2004, стр.77-108). (r_0 – равновесное расстояние между частицами в структуре). Ранее полагалось, что это трещины. Наличие щелевидных пустот в кристалле является причиной возникновения дислокаций.

В обменном взаимодействии между кластерами участвуют свободные изолированные частицы вследствие трансляционного движения внутри межкластерных пустот.

Энергия связи в плотноупакованном состоянии

Большие пустоты сферической формы в гранецентрированной структуре формируются пятью кластерами, а в объемцентрированной структуре – шестью кластерами. Радиус большой сферической пустоты составляет 1,5-2 нм. Минимальный размер частиц наполнителя сферической формы, которые достаточно быстро заполняют сфероидальные пустоты большого размера, для большинства веществ составляет 3-5 нм. В результате образуются монолитные частицы, которые обладают всеми свойствами композиционного кристалла и, взаимодействуя друг с другом, формируют отдельные кристаллические блоки размером 10-ть и более нм.

При понижении температуры пористая структура нивелируется, кластеры исчезают, и образуется монолитная плотноупакованная структура. Это принципиально отличает плотноупакованное состояние от твердого тела с кристаллическим строением. Процесс исчезновения кластерных образований с понижением температуры экспериментально установлен в работе (Макогонюк, 2009, стр.183-184).

Плотнупакованное состояние возникает для многих твердых тел вблизи абсолютного нуля температуры. В этом случае изменяются электрические и магнитные свойства, возникает сверхпроводимость, возрастают механические свойства, изменяются тепловые и оптические свойства.

Искусственно плотноупакованные структуры создают путем нанесения поверхностно активного покрытия из атомов, молекул или кластеров. В этом случае на кластерных структурах вначале происходит заполнение открытых межкластерных пустот, основного материала, а затем формируются монослои, которые связаны между собой диполь-дипольным взаимодействием вдоль поверхности и нормально к поверхности. Такое расположение молекул приводит к плотному монолитному образованию с энергией связи вдоль по-

верхности, превосходящее энергию связи нормально к поверхности. Поверхностно активное вещество наноразмерного уровня на твердой поверхности конструкционного материала представляет собой по существу новое агрегатное состояние с необычными физико-химическими, механическими, тепловыми, электрическими и магнитными свойствами.

Плотноупакованное состояние может возникать и при высоких температурах. Например, при охлаждении жидкости или при пластической деформации. Под действием сил поверхностного натяжения кластеры, обладающие дипольным электрическим моментом, выстраиваются вдоль одного из направлений. Поэтому в приповерхностных слоях энергия связи на одну частицу возрастает на величину электрон-дипольного и диполь-дипольного взаимодействия. Присутствие такого слоя особенно хорошо проявляется на деформационных кривых хрупких материалов, энергия связи у которых определяется преимущественно диполь-дипольным взаимодействием (Гречихин, 2004, стр.77-108), (Гречихин, 2008, стр.17-46).

В процессе нанесения упрочняющих покрытий было замечено, что с ростом толщины, покрытие отслаивается от основного материала, тогда как при малых толщинах происходит заметное их упрочнение. Когда атомы, молекулы упрочняющего материала обладают встроенным электрическим моментом, то они на поверхности основы выстраиваются, так, чтобы была реализована максимальная связь с основой и между частицами нанесенного поверхностного слоя. В этом случае энергия взаимодействия между частицами определяется преимущественно наведенной, электрон-дипольной и диполь-дипольной связями. В результате возникает плотноупакованный слой. По мере роста толщины нормально к поверхности связь между частицами ослабевает и в плотноупакованном слое начинают формироваться кластеры. Межкластерное взаимодействие резко падает как с основой, так и между кластерами поверхностного слоя. Вследствие этого происходит отслаивание.

В случае полупроводниковых лазеров сам кристалл является активной средой, а введение примесей приводит к заметному рассеянию лазерного излучения на микронеоднородностях. Поэтому нашли выход в том, что стали создавать полупроводниковые пленки, в которых кластерные структуры еще не созданы и отсутствуют межкластерные пустоты. Это наноуровень, а, следовательно, при изготовлении полупроводниковых лазеров используются нанотехнологии.

Таблица 3 – Значения энергий связи в различных типах взаимодействий атомарных частиц, величина дипольного электрического момента и энергия ионизации образующейся молекулы и их коэффициенты упругости

Table 3 – Terms for energy bonding in different types of atomic interactions, the magnitude of the electric dipole moment and the ionisation energy during the formation of molecules as well as their coefficients of elasticity

Tabela 3 – Oznake energetskog povezivanja u različitim tipovima interakcija atomskih čestica, dimenzija električnog dipolnog momenta i energija jonizacije pri stvaranju molekula, kao i njihovi koeficijenti elastičnosti

Параметры	Взаимодействующие частицы				
	In-N	In-P	In-As	In-Sb	In-Bi
$r_e, \text{Å}$	2,038	2,427	2,575	2,681	2,854
$E_{ков.}, \text{эВ}$	-2,800	-1,505	-1,254	-0,800	-0,580
$E_{ион.}, \text{эВ}$	-0,352	-0,179	-0,135	-0,085	-0,065
$E_{навед.}, \text{эВ}$	-0,262	-0,319	-0,402	-0,409	-0,606
$E_{e-d}, \text{эВ}$	0,583	0,515	0,443	0,456	0,426
$E_{d-d}, \text{эВ}$	0,168	0,175	0,123	0,104	0,073
$E_{рез.}, \text{эВ}$	-2,661	-1,31	-1,23	-0,73	-0,75
$P_z, \text{ Кл·м·10}^{30}$	5,44	4,11	4,61	4,71	5,10
$\theta_i, \text{эВ}$	10,4	8,19	7,83	7,21	6,54
$k_{упр.}, \text{ Н/м}$	395	183	141	115	85
$\Delta E_{кол.}, \text{эВ}$	0,091	0,044	0,028	0,022	0,017

Чтобы понять всю динамику работы полупроводникового лазера, надо четко представлять какие взаимодействия возникают между частицами, которые создают кристаллическую структуру полупроводникового лазера. Конкретно рассмотрим, как формируются бинарные молекулы типа A^3B^5 , а именно InN, InP, InAs, InSb и InBi. Для всех атомов перечисленных молекул встроенные дипольные электрические моменты приведены в табл. 1.

На основании данных табл. 1 и 2, выполнен расчет энергий связи всех перечисленных двухатомных молекул. Полученные значения соответствуют энергиям диссоциации. Результаты сведены в табл. 3

В процессе образования молекул A^3B^5 ковалентная связь является определяющей, которая обусловлена обменом валентных электронов взаимодействующих атомов и их обобщением в молекуле. Энергия ионизации для молекул выше энергии ионизации атома индия и не превышает энергию ионизации атомов V-ой группы таблицы Менделеева. Поэтому в рассмотренных двухатомных молекулах индий пребывает в виде положительного иона, а атомы V-ой группы таблицы Менделеева – в виде нейтральных атомов. Поэтому на рис. 1 показаны энергетические уровни для иона индия и нейтральных атомов остальных элементов.

Полученные расчетным путем коэффициенты упругости позволили определить величину колебательных уровней энергии в каждой молекуле. Значения коэффициентов упругости и энергий между двумя последовательными колебательными уровнями приведены в табл. 3.

Колебательные уровни энергии достаточно близко расположены и это позволило для молекул InN и InP осуществить эффективную резонансную перекачку энергии от возбужденных электронно-колебательных уровней к возбужденным дублетным нечетным уровням энергий ${}^2P_{1/2}$ и ${}^2P_{3/2}$, с которых происходит разрешенный переход только на нижележащие дублетные четные уровни ${}^2D_{3/2}^0$ и ${}^2D_{5/2}^0$ атомов азота и фосфора. Основной уровень этих атомов ${}^4S_{3/2}^0$. Тройной запрет по спину, четности и азимутальному квантовому числу не позволяет беспрепятственно валентным электронам переходить на основной уровень энергии атомов азота и фосфора. Чтобы реализовалась генерация, необходимо иметь первоначальный спонтанный переход, который был бы разрешен правилами отбора.

В рассматриваемом случае спонтанный переход может возникнуть как магнитный дипольный или электрический квадрупольный. Известный немецкий физик Штерн предвидел, а выполненный конкретный расчет в (Гречихин, 1970, стр.75-80) подтвердил, что магнитное дипольное и электрическое квадрупольное излучение возникает в том случае, когда на пространстве атома возникает сильное в первом случае неоднородное магнитное поле, а во втором случае сильное неоднородное электрическое поле. Конкретно в двухатомных молекулах ион одного из атомов на пространстве нейтрального атома создает мощное неоднородное электрическое поле, которое и снимает запрет на переход между четными или нечетными уровнями энергии атомной системы с изменением азимутального квантового числа $\Delta L = \pm 2$.

Запрет по спину снимает (J-J)-связь. Реально, особенно для атомов с большим значением заряда ядра, энергия связи валентного электрона определяется как нормальной связью Рассела-Саундерса, так и (J-J)-связью. Небольшая примесь (J-J)-связи снимает запрет по спину на спонтанный переход для дипольного электрического излучения. В результате первоначальный фотон может спонтанно возникнуть и произойдет генерация на переходе с запретом по спину, четности и азимутальному квантовому числу.

При возникновении генерации реализуется следующая ситуация. Валентный электрон пребывает в основном состоянии нейтрального атома не может. В молекуле он должен находиться в состоянии с энергией, равной энергии ионизации молекулы. Чтобы это произошло, необходимо перевести валентный электрон из основного состояния нейтрального атома в основное состояние нейтральной молекулы. Эту энергию предоставляет разрешенный переход ${}^2D_{3/2,5/2}^0 - {}^2P_{1/2,3/2}$, который дает излучение в атомах азота и фосфора в жесткой ультрафиолетовой области.

области. Для молекулы InBi разность энергий незначительная, а с учетом энергии вращения все энергетические уровни образуют сплошную область энергий с разными спинами. В результате генерацию получить на этой молекуле в нормальных условиях не возможно. Если и можно получить генерацию, то при температурах близких к абсолютному нулю в далекой инфракрасной области.

Следовательно, в полупроводниковых квантовых генераторах возникает кругооборот энергии, которую молекула получает от внешнего источника, а внутри происходит такое превращение, что позволяет получать генерацию. Поэтому квантовый генератор следует рассматривать как открытую энергосистему, которая черпает энергию извне и преобразует ее в виде вынужденного излучения, которое обладает специфическими свойствами. Каким требованиям должна удовлетворять такая открытая энергосистема, чтобы она работала с минимальными потерями, т.е., чтобы она позволяла преобразовывать один вид энергии в другой с максимальным коэффициентом преобразования, необходимо выяснить.

Энергия связи между атомами, молекулами и кластерами в полупроводниковых материалах типа A^3B^5

Все двухатомные молекулы типа A^3B^5 обладают внутренним электрическим моментом. Поэтому в процессе бинарного взаимодействия между собой в кластерных образованиях следует учитывать ковалентную, ионную, наведенную, электрон-дипольную и диполь-дипольную связи. Исходные данные, по которым производился расчет ковалентной и ионной связей, приведены в табл. 4.

Таблица 4 – Исходные данные для расчета бинарной связи молекул внутри кластера
Table 4 – Initial data for calculating the binary binding of molecules inside the cluster
Tabela 4 – Inicijalni podaci za izračunavanje binarnog povezivanja molekula unutar klastera

Моле-кула	Параметры						Энергия Связи, эВ
	$\theta_{i,1}$, эВ	$\theta_{i,2}$, эВ	r_1 , Å	r_2 , Å	Z_1^*	Z_2^*	
InN	10,4	30,10	2,195	1,238	1,583	2,583	-1,01
InP	8,19	23,73	2,412	1,44	1,370	2,370	-0,778
InAs	7,83	20,64	2,481	1,64	1,347	2,347	-0,747
InSb	7,21	18,89	2,559	1,74	1,279	2,279	-0,690
InBi	6,54	16,99	2,627	1,86	1,191	2,191	-0,755

Общий расчет выполнен в трех разных положениях молекул друг относительно друга, как это показано на рис. 2.

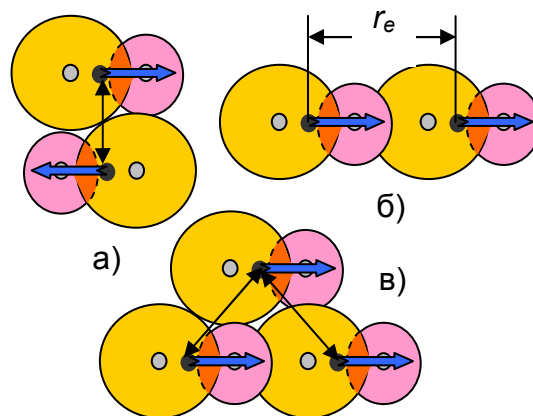


Рис. 2 – Разное расположение двухатомных молекул относительно друг друга в кластере:
а) – антипараллельное; б) – последовательное; в) – треугольное

Figure 2 – Different positions of diatomic molecules in the cluster:
a) antiparallel b) linear c) triangular

Slika 2 – Različiti položaji dvoatomskih molekula u klasteru:
a) antiparalelni, б) linearni, в) trougaoni

Для всех молекул энергия связи преимущественно определяется взаимным наведением зарядов, т.е., по существу взаимной поляризацией. Такая достаточно большая энергия связи между молекулами приводит к их взаимной коагуляции. Взаимодействие дипольных электрических моментов составляет не более 5% от общей энергии связи. Электрон-дипольное взаимодействие взаимно компенсируется.

В положении (в) рис. 2 реализуется наиболее плотная упаковка с гранецентрированной структурой кластера. При разогреве такой кластер не распадается вплоть до температуры ~ 10000 К. Основной кластер в этом случае содержит 21 молекулу. Размер кластерной структуры составляет $\sim 3 \cdot r_{эфф}$. ($r_{эфф}$ – эффективный радиус молекулы). В табл. 4. эффективный радиус молекулы обозначен как r_1 . Размер кластерной структуры составляет от 2,6 до 3,2 нм. Такого же размера возникают межкластерные пустоты, которые существенно препятствуют прохождению по таким структурам оптического излучения. Чтобы этого не происходило необходимо воспрепятствовать возникновению кластерных образований в полупроводниковых структурах. Поэтому при изготовлении полупроводниковых лазерных структур следует создавать тонкие слои не более 3-10 нм, и удерживать образующуюся пленку от сворачиваемости в кластерные образования. Для этого пленку следует наносить на подложку, с которой двухатомные молекулы обладали бы хорошей физической адгезией. Поэтому в качестве подложки следует использовать преимущественно диэлектрики. Чем больше реализуется энергия связи, тем толще слой генерирующего вещества можно нано-

силь на подложку и осуществить более мощный генератор. Кроме этого необходимо выдерживать условие: максимальный размер двухатомных молекул полупроводниковых материалов должен быть соизмерим с минимальным размером молекулы основы.

Размерному условию удовлетворяют кристаллы глинозема и кремнезема. Поэтому рассмотрим процесс, какой величиной физической адгезии на поверхности глинозема обладают двухатомные молекулы типа A^3B^5 .

Адгезия молекул типа A^3B^5 на поверхности кристалла глинозема

Вблизи температуры плавления кристаллов глинозема (2323 K) под действием сил поверхностного натяжения вдоль поверхности возникнут нитевидные структуры путем выстраивания молекул Al_2O_3 друг за другом. При резком охлаждении такой поверхности кластерные структуры не возникнут, и поверхность кристалла глинозема останется в виде плотно расположенных нитей, внутри которых электрические дипольные моменты расположены диаметрально противоположно. Такая неравновесная система со временем деградирует и перейдет в равновесное состояние вследствие образования кластерных структур. Чтобы этого не происходило, необходимо на поверхность кристалла глинозема нанести слой вещества, молекулы которого имели бы энергию связи большую, чем это необходимо для образования кластерных структур глинозема. Такую роль должны выполнять молекулы типа A^3B^5 .

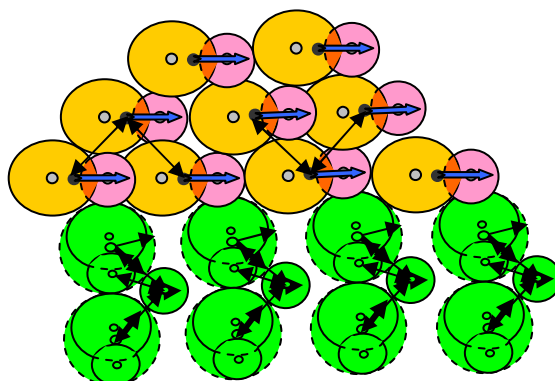


Рис. 3 – Примерная модель взаимодействия молекул типа A^3B^5 с нитевидной структурой на поверхности глинозема

Figure 3 – Approximate model of the interactions of an A^3B^5 type molecule with a fibrous surface structure of aluminium-oxide

Slika 3 – Približni model interakcija molekula tipa A^3B^5 sa vlaknastom površinskom stankturom aluminijum-oksida

На рис. 3 показана модель взаимодействия молекул типа A^3B^5 с нитиевидной структурой, состоящей из молекул Al_2O_3 . Учитывая принцип суперпозиции электрических полей, получается, что ближайшие друг к другу электрические диполи основы и адсорбированных частиц определяют энергию адсорбции. На основании рис. 3 энергия связи с основой определяется электрон-дипольным и диполь-дипольным взаимодействием молекул типа A^3B^5 с дипольным электрическим моментом молекулы AlO . Достаточно грубый расчет дает следующие значения: $InN-AlO - 0,414$ эВ; $InP-AlO - 0,407$ эВ; $InAs-AlO - 0,289$ эВ; $InSb-AlO - 0,250$ эВ и $InBi-AlO - 0,200$ эВ. Действительно, энергия физической адгезии достаточно значительная за исключением $InBi-AlO$. Это обеспечивает надежную связь адсорбированных молекул на поверхности кристалла глинозема при температуре его плавления. Молекулы $InBi$ на подложке глинозема при температуре его плавления не смогут адсорбироваться. Поэтому для $InBi$ не реализуется адсорбция и комбинация вида $InBi-AlO$ не позволяет реализовать квантовый генератор.

Заключение

Таким образом, на основании проведенного теоретического анализа различных типов взаимодействий молекул типа A^3B^5 на поверхности кристалла глинозема можно кратко сформулировать основные полученные результаты следующим образом:

1. Генерация в полупроводниковых лазерах на основе InN и InP реализуется на переходах ${}^2D^0_{3/2,5/2} - {}^4S^0_{3/2}$ с тройным запретом по четности, спину и азимутальному квантовому числу на нейтральных атомах азота и фосфора в области длин волн 520 и 880 нм соответственно.
2. Генерация в полупроводниковых лазерах на основе $InAs$ и $InSb$ возникает между высоковозбужденными уровнями энергии также с возможным тройным запретом в ближней инфракрасной области оптического излучения.
3. Генерация в полупроводниковом лазере на основе $InBi$ в принципе не может быть реализована.
4. При нанесении многослойного покрытия полупроводниковых материалов на основу глинозема температура его поверхности на глубину монокластерного слоя должна быть обеспечена примерно на 5-10% выше температуры плавления и при этом строго контролироваться.
5. Толщина покрытия не должна превышать 3-х максимум 10-и монокластерных слоев, что составляет от 3-х до 10-15 нм.
6. Молекулярные слои должны формироваться непосредственно на поверхности кристалла глинозема.

Литература /Literatura/ Literature

Бабичев, А.П., Бабушкина, Н.А., & Братковский, А.М. 1991, Физические величины. Справочник. Москва: Энергоатомиздат, стр.1232. (Babichev, A.P. and others. Physical quantities. The Handbook. – Moscow: “Energoatomizdat”, p.1232.)

Глинка, Н.Л. 1983. Общая химия. Учебное пособие для вузов. Ленинград: “Химия”, стр.704. (Glinka, N. L. 1983. General chemistry. Textbook for high school. – Leningrad: “Chemistry”, p.704).

Гречихин, Л.И. 1970. Условия и пределы применимости метода запрещенных переходов для диагностики плазмы. Измерительная техника, № 5, стр.75-80. (Gretchikhin, L.I. 1970. Condition and limits of applicability of the method of forbidden transitions for plasma diagnostics. /Measuring technique. № 5, pp.75-80).

Гречихин, Л.И. 2004. Физика наночастиц и нанотехнологий. Общие основы, механические, тепловые и эмиссионные свойства. Минск: УП «Технопринт», стр.77-108. (Gretchikhin, L.I. 2004. Physics of nanoparticles and nanotechnologies. General foundations, mechanical, thermal and emission properties. – Minsk: UP “Technoprint”, pp.77-108).

Гречихин, Л.И. 2008. Наночастицы и нанотехнологии. Минск: Изд. ИООО «Право и экономика», стр.17-46. (Gretchikhin, L.I. 2008. Nanoparticles and nanotechnologies. – Minsk: IOOO “Law and Economics”, pp.17- 46).

Гречихин, Л.И., & Шмермбекк, Ю. 2010. Наноуровень обоснования ОКГ конденсированных сред. Минск.: ИООО «Право и экономика», стр.6-33. (Gretchikhin, L.I., & Shmermbekk Yu. 2010. Nanolevel justification OQG condensed matter. – Minsk: IOOO “Law and Economics”, pp.6-33).

Еланский, Г.Н. 1991. Строение и свойства металлических расплавов. Москва: Металлургия, стр.160. (Elansky, G.N. 1991. Structure and properties of metallic melts. – Moscow: “Metallurgy”, p.160).

Коулсон, Ч. 1965. Валентность. Москва: Мир, стр.426. (Coulson, Ch. 1965. Valence. – Moscow: “Mir”, p.426.)

Макогонюк, Г.Д., Айдаров, В.М., & Седов А.Д. 2009. Наноструктура поверхности кристаллов, подвергшихся различным физическим воздействиям /Молодежный инновационный форум Приволжского федерального округа (УлГТУ, 12-14 мая 2009 г.). Сборник аннотаций – Ульяновск: УлГТУ, стр.183-184. (Macahonic, G.D., Azarov, S.M., & Sedov, A.D. 2009. Nanostructure surface crystals to be subjected to various physical effects. /Youth innovation forum of the Volga Federal district (UISTU 12-14 may 2009). The book of abstracts. – Ulyanovsk: UISTU, pp.183-184).

Радциг, А.А., & Смирнов, Б.М. 1980. Справочник по атомной и молекулярной физике. Москва: “Атомиздат”, стр.240. (Radzig, A.A., & Smirnov, B. M. Handbook of atomic and molecular physics. – Moscow: “Atomizdat”, pp.240).

Фок, В.А. 2008. Начала квантовой механики. Изд. 5-е. Москва: Изд-во ЛКИ, стр.376. (Fock, V.A. The beginning of quantum mechanics. – Moscow: Publishing House of LCG, p.376).

ANALYSIS OF SEMICONDUCTOR QUANTUM GENERATORS OF
A³B⁵ TYPE AT NANO LEVELS

Leonid Ivanovich Gretchihin
Minsk State Higher Aviation College, Minsk, Republic of Belarus

FIELD: electronics, materials (semiconducting quantum generators)
ARTICLE TYPE: Original Scientific Paper
ARTICLE LANGUAGE: Russian

Abstract:

The article describes the formation of the cluster grid structure of semiconductor crystals of A^3B^5 type.

The deformation of the electron shells of the atoms in semiconductor crystal structure elements has been presented. Crystals of the Indium compounds and the elements from Group 5 of the Mendeleev periodic table have been used to show the energy levels where a semiconductor quantum generator is generated. The technological conditions for an A^3B^5 type laser realisation have been defined.

Key words: *semiconductor laser, nanocluster level, generation.*

ANALIZA POLUPROVODNIČKIH KVANTNIH GENERATORA TIPA A^3B^5 PO NANO NIVOIMA

Leonid Ivanovič Grečihin
Beloruska državna vazduhoplovna akademija, Minsk,
Republika Belorusija

OBLAST: elektronika, materijali (poluprovodnički kvantni generatori)
VRSTA ČLANKA: originalni naučni članak
JEZIK ČLANKA: ruski

Sažetak:

U članku se obrazlaže formiranje klasterne rešetkaste strukture poluprovodničkog kristala tipa A^3B^5 . Predstavljen je način deformacije elektronskih opni atoma koji su u sastavu elemenata poluprovodničke kristalne strukture. Na primeru kristala iz jedinjenja indijuma i elemenata pete grupe Mendeljejeve tablice, utvrđeno je među kakvim energetskim nivoima dolazi do generisanja poluprovodničkog kvantnog generatora. Definisani su tehnološki uslovi za izradnju lasera tipa A^3B^5 .

Ključne reči: *poluprovodnički laser, nanoklasterni nivo, generisanje.*

Дата получения работы / Paper received on / Datum prijema članka: 19. 11. 2014.

Дата получения исправленной версии работы / Manuscript corrections submitted / Datum dostavljanja ispravki rukopisa on: 15. 12. 2014.

Дата окончательного согласования работы / Paper accepted for publishing / Datum konačnog prihvatanja članka za objavljivanje on: 17. 12. 2014.