

# Моделирование зонной структуры сверхрешеток на основе „разбавленных“ нитридов

© А.С. Дашков<sup>1</sup>, Н.А. Костромин<sup>2</sup>, А.В. Бабичев<sup>3</sup>, Л.И. Горай<sup>1</sup>, А.Ю. Егоров<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет им. Ж.И. Алфёрова Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 195251 Санкт-Петербург, Россия

<sup>3</sup> Национальный исследовательский университет ИТМО, 197101 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: dashkov.alexander.om@gmail.com

Поступила в Редакцию 30 сентября 2022 г.

В окончательной редакции 10 марта 2023 г.

Принята к публикации 2 мая 2023 г.

Предложен подход и реализован численный алгоритм расчета энергии межзонных переходов для полупроводниковых сверхрешеток на основе „разбавленных“ нитридов. С помощью разработанного алгоритма проведены численные эксперименты по моделированию характеристик структур на основе InGaAsN квантовых ям и подтверждена корректность реализованного подхода за счет сравнения с экспериментальными данными. Приведен метод оценки параметра гибридизации для структур на основе InGaAsN квантовых ям с долей индия < 30%. По результатам численных расчетов предложены параметры слоев сверхрешеток In(Ga)As/GaAsN для реализации активных областей спектрального диапазона 1.3 мкм.

**Ключевые слова:** сверхрешетки, разбавленные нитриды, межзонные переходы, численное моделирование, параметр гибридизации.

DOI: 10.21883/FTP.2023.03.55635.4163

## 1. Введение

Четверные твердые растворы  $A^{III}B^V$  на основе „разбавленных“ нитридов ( $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$  с содержанием азота  $x$  до 5%) позволяют уменьшить ширину запрещенной зоны, изменяя содержание азота при неизменном содержании индия [1]. Этот эффект открывает перспективы применения слоев InGaAsN, выращенных на подложках GaAs при создании длинноволновых (в спектральном диапазоне 1.3 мкм) устройств оптоэлектроники и фотоники [1–3] (солнечные элементы [4], биполярные транзисторы [2], лазеры [5]). В частности, структуры на основе InGaAsN перспективны с точки зрения реализации монолитных вертикально-излучающих лазеров (ВИЛ) спектрального диапазона 1.3 мкм на подложках GaAs [6–9]. Последние результаты исследований в этом направлении отражены в работе [10]. Более того, дополнительное внедрение Sb в слои азотсодержащих активных областей (использование GaInNAsSb квантовых ям, КЯ) позволяет реализовать ВИЛ спектрального диапазона на 1.55 мкм на подложках GaAs [3]. В то же время, в силу относительно низкого оптического усиления азотсодержащих КЯ, ВИЛ на их основе демонстрируют низкую выходную оптическую мощность, что в конечном счете ограничивает их модуляционные характеристики.

Одним из подходов по повышению модального усиления монолитных длинноволновых ВИЛ, наряду с применением сильно механически-напряженных КЯ [11,12], является использование короткопериодных сверхрешеток (СР).

Ранее представлены результаты по созданию длинноволновых ВИЛ, полученных по технологии спекания пластин [13–15] с активной областью на основе  $In_{0.57}Ga_{0.43}As/In_{0.53}Ga_{0.20}Al_{0.27}As$  СР, а также метаморфных ВИЛ с активной областью на основе  $In_{0.41}Ga_{0.59}As/In_{0.25}Ga_{0.75}As$  СР [16].

В данной работе представлены результаты численного расчета энергии перехода в активных областях на основе азотсодержащих СР для создания монолитных ВИЛ спектрального диапазона 1.3 мкм на подложках GaAs. Применение СР взамен InGaAsN КЯ позволяет не только повысить модальное усиление активных областей ВИЛ, но также препятствует эффекту интердиффузии слоев, типичному для активных областей на основе InGaAsN КЯ после высокотемпературного отжига [17].

## 2. Методика численного эксперимента

Расчет энергии межзонных переходов в СР определялся в несколько этапов. Первым шагом являлось построение потенциалов профилей потолка валентной зоны и дна зоны проводимости, и численное решение уравнения Шредингера (УШ) для обоих потенциалов. Результат численного расчета — положение энергетических уровней и вид соответствующих им волновых функций (вблизи  $\Gamma$ -точки в  $k$ -пространстве) [18–20]. Полученные волновые функции использовались для расчета величины дипольных матричных элементов взаимодействия. В качестве входных данных (основных энергетических и

механических параметров) для представленных расчетов использовались данные, представленные в работе [21].

## 2.1. Построение профиля электронного потенциала

Расчет профиля электронного потенциала (потолка валентной зоны, дна зоны проводимости) СР, опуская поправки, связанные с напряженностью структуры, сводился к одному из двух типов расчета:

— расчет потенциалов для тройных, четверных твердых растворов соединений  $A^{III}B^V$ , не содержащих азота ( $In_yGa_{1-y}As$ ,  $Al_xIn_yGa_{1-x-y}As$ );

— расчет для четверных твердых растворов с малой долей азота ( $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ ).

Первый тип расчетов являлся модельным. На основе значения искомого энергетического параметра ( $P$ ) для материалов  $A^{III}B^V$  с помощью закона Вегарда [22] получались значения требуемого параметра для четверных твердых растворов в общем случае. Точность полученного энергетического параметра, потенциала, в данном случае напрямую зависит от точности используемых энергетических параметров бинарных материалов, определенных с высокой точностью для целого ряда материалов [21].

Для случая четверных твердых растворов вида  $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$  линейная аппроксимация, используемая в законе Вегарда, для потенциала дна зоны проводимости неприменима. Как показано ранее [1], при малых долях азота исходная зона проводимости расщепляется на две ветви с энергиями  $E^+$  и  $E^-$ . При этом влияния на положение потолка валентной зоны азотная примесь практически не оказывает [23]. Как результат, для расчета энергетических параметров (энергетического положения ветвей зоны проводимости) используется модель взаимодействия двух энергетических зон (Band AntiCrossing, ВАС model) [1,24]. А для расчета GaNAsSb твердых растворов используется аналогичный расширенный подход (double ВАС model) [25–27]. Преимуществом ВАС модели является то, что она позволяет с помощью простых аналитических выражений определить положение ветвей зоны проводимости в предположении, что остаточные механические напряжения являются малой величиной:

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} \left( [E^C(k) + E^L] \pm \sqrt{(E^C(k) - E^L)^2 + 4V^2x} \right), \quad (1)$$

где  $E^C$  — дисперсия зоны проводимости соединения, атомы которого замещаются,  $E^L$  — энергия локализованных состояний замещающих атомов (азота),  $V$  — параметр гибридизации.

### 2.1.1. Параметры ВАС-модели

Точность рассчитанного энергетического положения дна зоны проводимости для „разбавленных“ нитридов

напрямую зависит от точности определения параметров  $E^L$  и  $V$ . Значения этих параметров восстанавливаются из экспериментальных данных для каждого заданного разбавленного четверного твердого раствора [1]. При этом в разных литературных источниках одного и того же заявленного химического состава зачастую представлены различные значения  $E^L$  и  $V$  [28]. Данные различия могут быть обусловлены рядом причин: малыми отклонениями истинного состава от заявленного; наличием неучтенных механических напряжений в слоях структуры; внутренним различием структуры слоев твердого раствора.

Как показано ранее [28], последний фактор является наиболее значимым. Расчеты, проведенные методом сильной связи, показали, что ближайшее окружение атомов азота может быть представлено в виде пяти различных конфигураций, каждая из которых характеризуется разными значениями  $E^L$  и  $V$ . В результате, какой тип конфигурации реализуется в исследуемой структуре, зависит как от химического состава (доли индия  $y$ ), так и от условий, при которых происходила эпитаксия и постростовая обработка образцов. В частности, при использовании метода газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений преимущественно формируются Ga–N-связи [28]. Тем не менее энергетически наиболее выгодной является конфигурация, в которой все ближайшие соседние атомы азота — атомы индия (4In) [28,29]. В случае отжига структур происходит структурный переход к данной конфигурации, что подтверждается увеличением ширины запрещенной зоны после высокотемпературного отжига структур [28,29]. Поэтому, в расчетах были использованы параметры для конфигурации 4In.

Таким образом, для определения значений параметров  $E^L$  и  $V$  использовалась квадратичная интерполяция, полученная на основе отобранных экспериментальных данных. Для параметра  $E^L$  интерполяция имела вид [30]:

$$E^L = 1.65(1 - y) + 1.44y - 0.38y(1 - y). \quad (2)$$

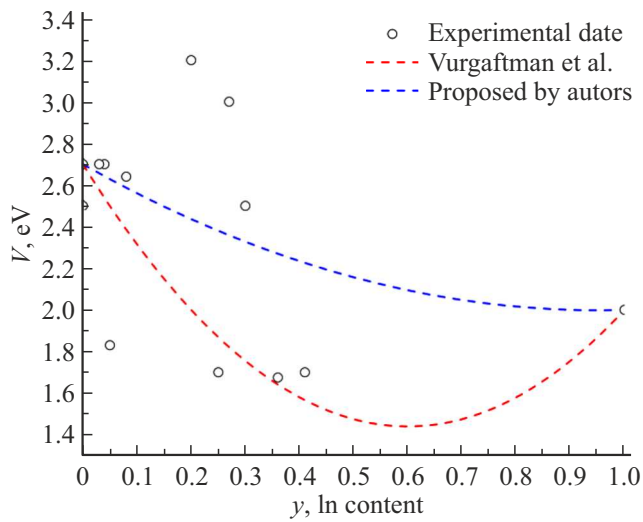
Для параметра  $V$  была построена квадратичная интерполяция с фиксированными краевыми значениями в точках, соответствующих GaAsN и InAsN. Однако в отличие от интерполяции, предложенной в [30]:

$$\begin{aligned} V &= 2.7(1 - y) + 2.0y - 3.5y(1 - y) \\ &= 3.5y^2 - 4.2y + 2.7, \end{aligned} \quad (3)$$

экспериментальные значения были дополнены обновленными данными [31–45] и учитывались при построении интерполяции с весовыми коэффициентами. Так, если для одного и того же состава в литературе встречались несколько ( $N$ ) значений параметра  $V$ , то каждое из них бралось с весом  $1/N$ . Результатом стала интерполяция

**Таблица 1.** Сравнение экспериментальных (из положения пика ФЛ, измеренного при температуре 300 К) и теоретических значений энергии межзонного перехода для тестовых структур на основе InGaAsN КЯ, рассчитанных на основе предложенной интерполяции ( $\Delta E_{th1}$ ) и предложенной ранее ( $\Delta E_{th2}$ )

№ структуры	Состав	$\Delta E_{exp}$ , эВ	$\Delta E_{th1}$ , эВ	$\epsilon_{th1}$ , %	$\Delta E_{th2}$ , эВ	$\epsilon_{th2}$ , %
1	In <sub>0.3</sub> Ga <sub>0.7</sub> As <sub>0.992</sub> N <sub>0.008</sub> —GaAs КЯ [46]	0.99	1.14	14.1	1.18	18.1
2	In <sub>0.05</sub> Ga <sub>0.95</sub> As <sub>0.98</sub> N <sub>0.02</sub> —GaAs КЯ [47]	1.17	1.21	3.4	—	—
3	In <sub>0.3</sub> Ga <sub>0.7</sub> As <sub>0.996</sub> N <sub>0.004</sub> —GaAs КЯ [48]	1.06	1.19	12.3	1.22	15
4	In <sub>0.36</sub> Ga <sub>0.64</sub> As <sub>0.983</sub> N <sub>0.017</sub> —GaAs [49]	0.985	1.05	6.5	1.12	13.7
5	In <sub>0.36</sub> Ga <sub>0.74</sub> As <sub>0.981</sub> N <sub>0.019</sub> —GaAs [50]	0.972	1.08	11.1	1.13	16.2
6	In <sub>0.3</sub> Ga <sub>0.7</sub> As <sub>0.972</sub> N <sub>0.028</sub> —GaAs [50]	0.972	1.08	11.1	1.15	18.3
7	In <sub>0.35</sub> Ga <sub>0.65</sub> As <sub>0.92</sub> N <sub>0.018</sub> —GaAs [51] 3 КЯ	0.999	1.05	5.1	1.10	10.1
8	In <sub>0.033</sub> Ga <sub>0.012</sub> As <sub>0.012</sub> N <sub>0.012</sub> —GaAs <sub>0.012</sub> N <sub>0.012</sub> КЯ [52]	0.98	0.96	2	0.96	2



**Рис. 1.** Зависимость параметра гибридизации  $V$  от мольной доли In. Экспериментальные данные [31–45] представлены точками, интерполяционные кривые: красная пунктирная линия — предложенная ранее в работе [30], синяя пунктирная линия — предложенная авторами данной работы.

вида (см. рис. 1):

$$V = 0.773y^2 - 1.473y + 2.7. \quad (4)$$

Полученная интерполяции, по-прежнему, не дает полного совпадения со всеми экспериментальными данными (рис. 1, табл. 1) [46–52], тем не менее она позволяет уменьшить расхождения по сравнению с результатами, полученными на основе интерполяции по выражению (3) (см. табл. 1).

## 2.2. Учет поправок за счет механического напряжения в слоях структуры

В приведенном численном расчете были учтены поправки, связанные с механическим напряжением в структуре СР. С учетом тензора деформации  $\epsilon_{i,j}$ , сдвиговые

поправки к положению дна зоны проводимости и потолка валентной зоны представлены в виде [53]:

$$\delta E_{E_c} = a_c S p \hat{\epsilon}, \quad (5)$$

$$\delta E_{E_v} = a_v S p \hat{\epsilon}, \quad (6)$$

где  $S p \hat{\epsilon} = \epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}$  — след тензора деформации.

Компоненты тензора деформации для напряженного слоя можно выразить через постоянные решетки слоя  $a_l$  и подложки  $a_0$ , а также через упругие константы материала  $c_{11}, c_{12}$ :

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{a_0 - a_l}{a_l}, \quad (7)$$

$$\epsilon_{zz} = -\frac{2c_{12}}{c_{11}} \epsilon_{xx}. \quad (8)$$

Учитывая различия в симметрии состояний валентной зоны и зоны проводимости, а также спин-орбитального взаимодействия, с помощью гамильтониана Бира–Пикуса итоговые поправки к положению дна зоны проводимости и потолка валентной зоны можно выразить следующим образом [53]:

$$E_{C-HH}^\Gamma = E_g^\Gamma + \delta E_{E_c} + \delta E_{E_v} - Q_\epsilon, \quad (9)$$

$$E_{C-LH}^\Gamma = E_g^\Gamma + \delta E_{E_c} + \delta E_{E_v} + \frac{1}{2} \left( Q_\epsilon - \Delta_{SO} + \sqrt{\Delta_{SO}^2 + 2\Delta_{SO}Q_\epsilon + 9Q_\epsilon^2} \right), \quad (10)$$

$$E_{C-SO}^\Gamma = E_g^\Gamma + \delta E_{E_c} + \delta E_{E_v} + \frac{1}{2} \left( Q_\epsilon - \Delta_{SO} - \sqrt{\Delta_{SO}^2 + 2\Delta_{SO}Q_\epsilon + 9Q_\epsilon^2} \right), \quad (11)$$

где  $\Delta_{SO}$  — энергия спин-орбитального расщепления без деформации, а потенциал сдвиговой деформации  $b$  включен в  $Q_\epsilon$  на основе выражения

$$Q_\epsilon = \frac{b}{2} \cdot (\epsilon_{xx} + 2\epsilon_{yy} - 2\epsilon_{zz}). \quad (12)$$

**Таблица 2.** Сравнение теоретических значений энергии межзонного перехода для тестовых структур на основе InGaAsN КЯ, рассчитанных с помощью метода стрельбы ( $\Delta E_{sh}$ ) и метода конечных элементов ( $\Delta E_{fem}$ )

№ структуры	Состав	$\Delta E_{exp}$ , эВ	$\Delta E_{sh}$ , эВ	$\Delta E_{fem}$ , эВ	$\varepsilon_{sh}$ , %	$\varepsilon_{fem}$ , %
1	In <sub>0.3</sub> Ga <sub>0.7</sub> As <sub>0.992</sub> N <sub>0.008</sub> —GaAs КЯ [44]	0.99	1.14	1.13	14.1	14.1
2	In <sub>0.05</sub> Ga <sub>0.95</sub> As <sub>0.98</sub> N <sub>0.02</sub> —GaAs КЯ [45]	1.17	1.21	1.22	3.4	4.2
3	In <sub>0.3</sub> Ga <sub>0.7</sub> As <sub>0.996</sub> N <sub>0.004</sub> —GaAs КЯ [46]	1.06	1.19	1.19	12.3	12.3
4	In <sub>0.36</sub> Ga <sub>0.64</sub> As <sub>0.983</sub> N <sub>0.017</sub> —GaAs [47]	0.985	1.05	1.06	6.5	7.6
5	In <sub>0.36</sub> Ga <sub>0.74</sub> As <sub>0.981</sub> N <sub>0.019</sub> —GaAs [48]	0.972	1.08	1.07	11.1	10
Среднее отклонение					9.5	9.6

### 2.3. Численное решение уравнения Шредингера

Для нахождения собственных значений энергии для заданного потенциала и эффективной массы электрона и дырки использовались методы „стрельбы“ (shooting method [54,20]) и „конечных элементов“ (МКЭ — finite element method [20]). В случае применения метода стрельбы значения волновой функции определялись методом матриц переноса, а собственные значения энергии определялись методом бисекции. Стоит отметить, что конечная реализация не являлась классическим методом матриц переноса, а была его модифицированной версией [55], для устранения возможной численной неустойчивости классического метода. Для решения УШ значение эффективной массы электрона определялось на основе выражения

$$(m^*(x, E_q))^{-1} = (m_0)^{-1} \times \left\{ 1 + 2F + \frac{E_p}{3} \left[ \frac{2}{E_{C-LH}^{\Gamma} + E_q} + \frac{2}{E_{C-SO}^{\Gamma} + E_q} \right] \right\}, \quad (13)$$

где  $F$  — параметр Кейна, представляющий член возмущения 2-го порядка  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  теории,  $E_p$  — матричный элемент импульса между  $s$ -подобными зонами проводимости и  $p$ -подобными валентными зонами в энергетических единицах,  $E_q$  — энергия квантования энергии состояний над или под зоной проводимости. Эффективная масса дырок определялась с помощью параметров Латтинжера в предположении, что малые доли азота не оказывают влияния на параметры валентной зоны, в частности на эффективную массу дырок [23,30]. В качестве граничных условий на границе барьер/яма использовались граничные условия Бастарда [20]. В случае метода конечных элементов положение энергии и волновые функции определялись с помощью численного решения задачи на собственные числа матрицы соответствующего гамильтониана без учета степени непараболичности дисперсии. Процедура моделирования в обоих случаях была реализована в виде программного кода на языке Python3<sup>TM</sup>, интерполяция параметров производилась с помощью библиотеки SciPy<sup>®</sup>, решение задачи нахождения собственных чисел — с помощью библиотеки

NumPy<sup>®</sup>. Для двукратного ускорения численного расчета процесс исполнения программы был разделен на два подпроцесса для нахождения собственных значений энергии для каждого из профилей потенциалов и на четыре подпроцесса для нахождения волновых функций, соответствующих дискретным уровням энергии.

Для демонстрации применимости обоих методов в большей части расчетов приведены результаты, полученные обоими методами (табл. 2). Но конечной целью являлось применение именно метода стрельбы, в связи с его меньшей асимптотической сложностью [20], что является важным фактором при моделировании, в частности при оптимизации СР и квантово-каскадных структур [20].

### 3. Результаты и обсуждение

Для проверки разработанного алгоритма расчета было проведено моделирование тестовых структур четверных твердых растворов InGaAsN с известной энергией кванта излучения (положение пика в экспериментальном спектре фотолюминесценции (ФЛ)). Расчет проводился в несколько этапов:

- вводились входные данные структуры: химический состав (мольные доли), параметры периодов (толщины) СР;
- строились энергетическая диаграмма и волновые функции для полученных собственных значений энергии в УШ;
- по полученным волновым функциям рассчитывались дипольные матричные элементы взаимодействия для определения наиболее вероятных переходов.

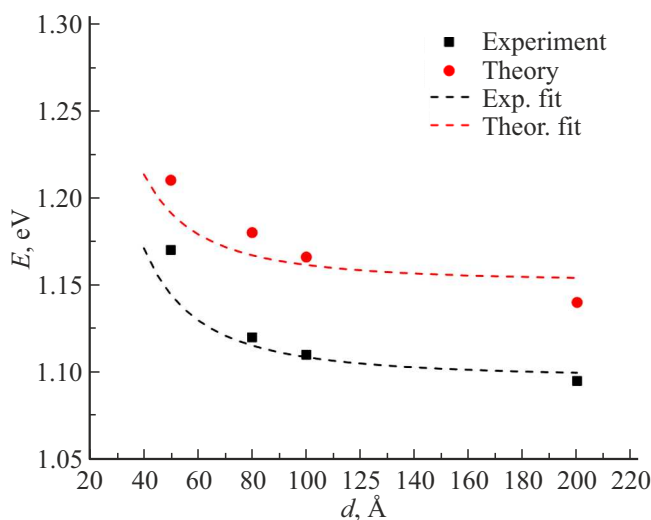
Моделирование многопериодных СР в реализации в рамках метода стрельбы ограничивалось моделированием шести периодов соответствующей решетки. Дальнейшее увеличение числа периодов не влияло на положение электронных энергетических уровней и вид волновых функций. Для меньшего числа периодов отличие в положении уровней составляло  $\sim 1\%$ .

В качестве тестовых модельных структур использовались структуры на основе In<sub>y</sub>Ga<sub>1-y</sub>N<sub>x</sub>As<sub>1-x</sub> КЯ с долей индия  $y \leq 0.3$  [46–52]. Результаты, полученные

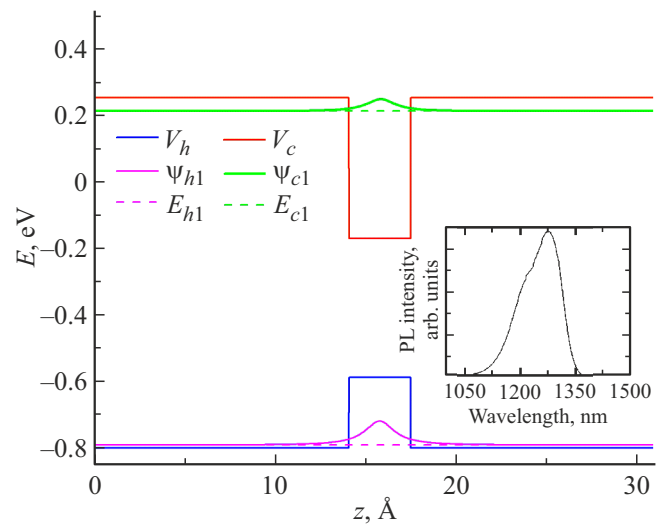
в ходе моделирования, представлены в табл. 1 и 2. Показано, что итоговая погрешность определения в используемом методе расчета не превышает 14%, по сравнению с 18% для метода, предложенного ранее [30]. Также для структуры 2, представленной в табл. 1, были проведены численные эксперименты по определению характера зависимости энергии перехода от толщины КЯ. Показано, что наибольшее отклонение расчета от экспериментального значения достигается при толщине КЯ 8 нм и составляет 5%. Полученная зависимость, представленная на рис. 2 вместе с экспериментальными данными, свидетельствует о том, что рассчитанные значения также попадают (с малым значением суммарного отклонения) на аппроксимационную кривую, имеющую обратную квадратичную зависимость от толщины КЯ. Данный характер зависимости был предложен для экспериментальных точек в работе [47].

После проверки подхода на тестовых структурах на основе InGaAsN КЯ был проведен верификационный расчет энергии перехода активной области на основе азотсодержащей СР. В данном расчете рассматривалась СР1, состава InAs/GaAs<sub>0.966</sub>N<sub>0.034</sub> с толщинами слоев 0.34/2.82 нм соответственно, исследованная ранее экспериментально в работе [54]. Энергия кванта для данной СР составила 0.96 эВ по результатам измерения спектра ФЛ.

Энергетическая диаграмма, дискретные энергетические уровни и волновые функции для данной СР представлены на рис. 3. Энергия перехода  $e_1 - hh_1$  составила 1.00 эВ, что согласуется с экспериментально полученным значением 0.96 эВ (соответствует длине волны излучения 1276 нм). Погрешность расчета для СР1 составила ~ 4%. Аналогичный расчет был произведен с



**Рис. 2.** Зависимость экспериментальной и расчетной энергии перехода для структуры на основе In<sub>0.05</sub>Ga<sub>0.95</sub>As<sub>0.98</sub>N<sub>0.02</sub> КЯ [47] от толщины квантовой ямы. Пунктирные линии — результат аппроксимации по точкам расчетных и экспериментальных значений [47].



**Рис. 3.** Вид профиля дна зоны проводимости и потолка валентной зоны, а также собственные значения энергии  $E_{ci}$ ,  $E_{hi}$  и соответствующих им волновых функций для одного периода структуры СР2. (Цветной вариант рисунка представлен в электронной версии статьи).

помощью метода конечных элементов — отклонение от рассчитанных выше значений составило ~ 4 мэВ.

Таким образом, показано, что имеется достаточное соответствие энергии оптического перехода и положения пика спектра ФЛ. Использование потенциальных барьеров толщиной ~ 3 нм обеспечивает ФЛ в спектральном диапазоне 1.25–1.27 мкм, требуемую для создания ВИЛ спектрального диапазона 1.3 мкм.

Для определения параметров СР, излучающих в требуемом спектральном диапазоне на основе альтернативных составов и толщин, проводились дополнительные численные эксперименты с варьированием толщин и составов слоев СР. Однако пространство поиска оптимальных параметров в таком случае оказывается слишком большим для исследования, и было принято решение его сузить: рассматривались несколько видов СР, различающиеся по составу слоев; для каждого из видов СР дополнительно вводились ограничения на толщины слоев.

Во всех случаях нами рассматривались СР, состоящие из слоев GaAsN/In(Ga)As. Мольная доля азота в слоях GaAsN была подобрана на основе анализа пика в спектрах ФЛ [56,57]. Для мольной доли индия в In(Ga)As были предложены два состава: InAs (СР1, СР3) и In<sub>0.8</sub>Ga<sub>0.2</sub>As (СР2, СР4). Первый вариант рассматривался в силу того, что уже имелись экспериментальные результаты, указывающие на наличие энергии перехода в требуемом диапазоне [54]. Второй состав был предложен как альтернативный с более малой долей индия. Ограничение на толщину слоя InGaAs были обусловлены сложностью роста толстых планарных слоев данного состава [58].

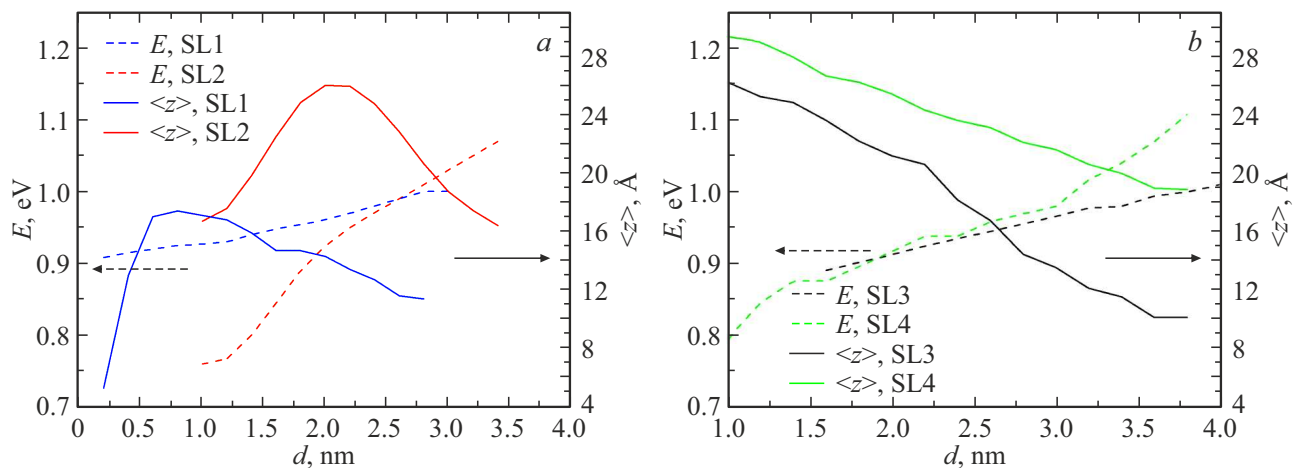


Рис. 4. Зависимость энергии основного перехода и величины дипольного матричного элемента для структур CP1 (SL1) и CP2 (SL2) (a); CP3 (SL3) и CP4 (SL4) (b).

Для структуры CP1 было проведено варьирование толщин барьерного слоя в диапазоне  $d = 0.30\text{--}2.82$  нм [59]. Аналогичные расчеты были проведены для  $\text{GaAs}_{0.966}\text{N}_{0.034}/\text{In}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{As}$  (CP2) с толщиной слоя КЯ 0.30 нм (один монослой) и толщинами барьерного слоя  $d = 1.00\text{--}4.96$  нм.

Также дополнительно были рассмотрены структуры CP3 ( $\text{GaAs}_{0.966}\text{N}_{0.01}/\text{InAs}$ ), CP4 ( $\text{GaAs}_{0.966}\text{N}_{0.01}/\text{In}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{As}$ ) с аналогичным варьированием толщины барьерного слоя и толщиной слоя КЯ 0.30 нм. Меньший мольный объем азота в барьерных слоях данных CP был выбран для уменьшения напряженности и дефектности структур [60,61].

Результаты численного расчета представлены на рис. 4. Показано, что требуемую энергию кванта (0.97–0.99 эВ) можно достичь для структур CP1, CP2 при толщинах барьеров 2–3 нм, для структур CP3, CP4 при толщинах в диапазоне 2.5–3.5 нм.

#### 4. Заключение

В работе предложен алгоритм расчета энергии межзонных переходов для четверных твердых растворов на основе „разбавленных“ нитридов. Были рассмотрены его основные составляющие: расчет положения собственных уровней энергии для заданных потенциалов краев зоны проводимости и валентной зоны, расчет ширины запрещенной зоны в случае четверного раствора на основе „разбавленных“ нитридов, алгоритм оценки параметра гибридизации.

Для проверки разработанного алгоритма были проанализированы структуры на основе  $\text{InGaAsN}$  КЯ и продемонстрирована применимость алгоритма путем сопоставления расчетных значений с экспериментальными данными положения пика спектра ФЛ, а также с результатами, полученными с помощью альтернативного

метода оценки параметра гибридизации. На основе проведенных расчетов были предложены параметры слоев сверхрешеток  $\text{In(Ga)As/GaAsN}$  для реализации активных областей спектрального диапазона 1.3 мкм.

#### Финансирование работы

Работа авторов из Санкт-Петербургского национального исследовательского Академического университета им. Ж.И. Алфёрова Российской академии наук выполнена за счет гранта Российского научного фонда № 21-19-00718, <https://rscf.ru/project/21-19-00718/> в части моделирования зонной структуры. Работа авторов из Университета ИТМО выполнена при финансовой поддержке программы „Приоритет 2030“ в части измерения спектров ФЛ.

#### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

#### Список литературы

- [1] C. Skierbiszewski, P. Perlin, P. Wisniewski, T. Suski, J.F. Geisz, K. Hingerl, W. Jantsch, D.E. Mars, W. Walukiewicz. *Phys. Rev. B*, **65** (3), 035207 (2001).
- [2] A. Erol. *Dilute III–V Nitride Semiconductors and Material Systems* (Berlin–Heidelberg–N. Y., Springer Verlag, 2008).
- [3] T. Sarmiento, Li Zhao, P. Moser, T. Li, Y. Huo, J.S. Harris. *IEEE Phot. Techn. Lett.*, **31** (20), 1607 (2019).
- [4] A.S. Gudovskikh, A.A. Lazarenko, E.V. Pirogov, M.S. Sobolev, K.S. Zelentsov, I.A. Morozov, A.Yu. Egorov. *Semiconductors*, **50** (5), 652 (2016).
- [5] M. Henini. *Dilute nitride semiconductors* (Amsterdam–Boston–Heidelberg–London–N. Y.–Oxford–Paris–San Diego–San Francisco–Singapore–Sydney–Tokyo, Elsevier, 2005).
- [6] Y. Onishi, N. Saga, K. Koyama, H. Doi, T. Ishizuka, T. Yamada, K. Fujii, H. Mori, J.Hashimoto, M. Shimazu, A. Yama-

- guchi, T. Katsuyama. *IEEE J. Select. Topics Quant. Electron.*, **15** (3), 838 (2009).
- [7] J. Vukusic, P. Modh, A. Larsson, M. Hammar, S. Mogg, U. Christiansson, V. Oscarsson, E. Odling, J. Malmquist, M. Ghisoni, P. Gong, E. Griffiths, A. Joel. *Electron. Lett.*, **39** (8), 662 (2003).
- [8] H. Riechert, A. Ramakrishnan, G. Steinle. *Semicond. Sci. Techn.*, **17** (8), 892 (2002).
- [9] G. Steinle, H. Riechert, A.Yu. Egorov. *Electron. Lett.*, **37** (2), 93 (2001).
- [10] M. Gebiski, D. Dontsova, N. Haghghi, K. Nunna, R. Yanka, A. Johnson, R. Pelzel, J.A. Lott. *OSA Continuum*, **3** (7), 1952 (2020).
- [11] A. Babichev, S. Blokhin, A. Gladyshev, L. Karachinsky, I. Novikov, A. Blokhin, M. Bobrov, N. Maleev, V. Andryushkin, E. Kolodeznyi, D. Denisov, N. Kryzhanovskaya, K. Voropaev, V. Ustinov, A. Egorov, H. Li, S. Tian, S. Han, G. Sapunov, D. Bimberg. *IEEE Phot. Techn. Lett.*, **35** (6), 297 (2023).
- [12] A.V. Babichev, L.Y. Karachinsky, I.I. Novikov, A.G. Gladyshev, S.A. Blokhin, S. Mikhailov, V. Iakovlev, A. Sirbu, G. Stepniak, L. Chorchos, J.P. Turkiewicz. *IEEE J. Quant. Electron.*, **53** (6), 1 (2017).
- [13] S. Blokhin, A. Babichev, A. Gladyshev, L. Karachinsky, I. Novikov, A. Blokhin, S. Rochas, D. Denisov, K. Voropaev, A. Ionov, N. Ledentsov, A. Egorov. *Electron. Lett.*, **57**, 697 (2021).
- [14] S.A. Blokhin, A.V. Babichev, A.G. Gladyshev, L.Ya. Karachinsky, I.I. Novikov, A.A. Blokhin, M.A. Bobrov, N.A. Maleev, V.V. Andryushkin, D.V. Denisov, K.O. Voropaev, I.O. Zhumaeva, V.M. Ustinov, A.Yu. Egorov, N.N. Ledentsov. *IEEE J. Quant. Electron.*, **58** (2), 2400115 (2022).
- [15] S.A. Blokhin, A.V. Babichev, A.G. Gladyshev, I.I. Novikov, A.A. Blokhin, M.A. Bobrov, N.A. Maleev, V.V. Andryushkin, D.V. Denisov, K.O. Voropaev, V.M. Ustinov. *Opt. Eng.*, **61** (9), 096109 (2022).
- [16] N.V. Kryzhanovskaya, A.I. Likhachev, S.A. Blokhin, A.A. Blokhin, E.V. Pirogov, M.S. Sobolev, A.V. Babichev, A.G. Gladyshev, L.Ya. Karachinsky, I.I. Novikov, V.V. Andryushkin, D.V. Denisov, A.Yu. Egorov. *Laser Phys. Lett.*, **19** (7), 075801 (2022).
- [17] M. Albrecht, V. Grillo, T. Remmele, H.P. Strunk, A.Yu. Egorov, Gh. Dumitras, H. Riechert, A. Kaschner, R. Heitz, A. Hoffmann. *Appl. Phys. Lett.*, **81** (15), 2719 (2002).
- [18] A.S. Dashkov, L.I. Goray. *J. Phys.: Conf. Ser.*, **1410**, 012085 (2019).
- [19] A.S. Dashkov, L.I. Goray. *J. Semicond.*, **54**, 1823 (2020).
- [20] C. Jirauschek, T. Kubis. *Appl. Phys. Rev.*, **1** (1), 011307 (2014).
- [21] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan. *J. Appl. Phys.*, **89** (11), 5815 (2001).
- [22] A.R. Denton, N.W. Ashcroft. *Phys. Rev. A*, **43** (6), 3161 (1991).
- [23] А.Ю. Егоров. Автореф. докт. дис. (СПб., СПбАН РАН, 2011).
- [24] W. Shan, W. Walukiewicz, J.W. Ager III, E.E. Haller, J.F. Geisz, D.J. Friedman, J.M. Olson, Sarah R. Kurtz. *J. Appl. Phys.*, **86** (4), 2349 (1999).
- [25] Y.T. Lin, T.C. Ma, T.Y. Chen, H.H. Lin. *Appl. Phys. Lett.*, **93** (17), 171914 (2008).
- [26] A. Aho, M. Korpijärvi, R. Isoaho, P. Malinen, A. Tukiainen, M. Honkanen, M. Guina. *J. Cryst. Growth*, **438**, 49 (2016).
- [27] R. Isoaho, A. Aho, A. Tukiainen, T. Salminen, M. Guina. *J. Cryst. Growth*, **584**, 126574 (2022).
- [28] R.J. Potter, N. Balkan. *J. Phys. Condens. Matter*, **16** (31), S3387 (2004).
- [29] D. Alexandropoulos, M.J. Adams. *IEE Proc. Optoelectron.*, **150** (2), 105 (2003).
- [30] I. Vurgaftman, J.R. Meyer. *J. Appl. Phys.*, **94** (6), 3675 (2003).
- [31] S.A. Choulis, S. Tomic, E.P. O'Reilly, T.J.C. Hosea. *Solid State Commun.*, **125** (3–4), 155 (2003).
- [32] S.A. Choulis, T.J.C. Hosea, S. Tomic, M. Kamal-Saadi, A.R. Adams, E.P. O'Reilly, B.A. Weinstein, P.J. Klar. *Phys. Rev. B*, **66** (16), 165321 (2002).
- [33] Z. Pan, L.H. Li, Y.W. Lin, B.Q. Sun, D.S. Jiang, W.K. Ge. *Appl. Phys. Lett.*, **78** (15), 2217 (2001).
- [34] A.Yu. Egorov, V.A. Odnoblyudov, N.V. Krizhanovskaya, V.V. Mamutin, V.M. Ustinov. *Semiconductors*, **36** (12), 1355 (2002).
- [35] A. Polimeni, M. Capizzi, M. Geddo, M. Fischer, M. Reinhardt, A. Forchel. *Phys. Rev. B*, **63** (19), 195320 (2001).
- [36] S.A. Choulis, T.J.C. Hosea, S. Tomic, M. Kamal-Saadi, B.A. Weinstein, E.P. O'Reilly, A.R. Adams, P.J. Klar. *Phys. Status Solidi B*, **235** (2), 384 (2003).
- [37] H.D. Sun, M.D. Dawson, M. Othman, J.C.L. Yong, J.M. Rorison, P. Gilet, L. Grenouillet, A. Million. *Appl. Phys. Lett.*, **82** (3), 376 (2003).
- [38] W. Shan, W. Walukiewicz, J.W. Ager, E.E. Haller, J.F. Geisz, D.J. Friedman, J.M. Olson, S.R. Kurtz. *Phys. Rev. Lett.*, **82** (6), 1221 (1999).
- [39] P.J. Klar, H. Gruning, W. Heimbrot, J. Koch, W. Stolz, P.M.A. Vicente, A.M. Kamal Saadi, A. Lindsay, E.P. O'Reilly. *Phys. Status Solidi*, **223** (1), 163 (2001).
- [40] A. Lindsay, E.P. O'Reilly. *Solid State Commun.*, **112** (8), 443 (1999).
- [41] W. Shan, W. Walukiewicz, K.M. Yu, J.W. III Ager, E.E. Haller, J.F. Geisz, D.J. Friedman, J.M. Olson, S.R. Kurtz, H.P. Xin, C.W. Tu. *Phys. Status Solidi*, **223** (1), 75 (2001).
- [42] I. Suemune, K. Uesugi, W. Walukiewicz. *Appl. Phys. Lett.*, **77** (19), 3021 (2000).
- [43] P. Perlin, P. Wisniewski, C. Skierbiszewski, T. Suski, E. Kaminska, S.G. Subramanya, E.R. Weber, D.E. Mars, W. Walukiewicz. *Appl. Phys. Lett.*, **76** (10), 1279 (2000).
- [44] C. Skierbiszewski, P. Perlin, P. Wisniewski, T. Suski, W. Walukiewicz, W. Shan, J.W. III Ager, E.E. Haller, J.F. Geisz, D.J. Friedman, J.M. Olson, S.R. Kurtz. *Phys. Status Solidi*, **216** (1), 135 (1999).
- [45] P.J. Klar, H. Gruning, J. Koch, S. Schafer, K. Volz, W. Stolz, W. Heimbrot, A.M. Kamal Saadi, A. Lindsay, E.P. O'Reilly. *Phys. Rev. B*, **64** (12), 121203 (2001).
- [46] X. Yang, M.J. Jurkovic, J.B. Heroux, W.I. Wang. *Appl. Phys. Lett.*, **75** (2), 178 (1999).
- [47] E.D. Jones, N.A. Modine, A.A. Allerman, I.J. Fritz, S.R. Kurtz, A.F. Wright, S.T. Tozer, X. Wei. In *Light-Emitting Diodes: Research, Manufacturing, and Applications III* (San Jose, California, USA, 1999) v. 3621, p. 52.
- [48] M. Kondow, T. Kitatani, S. Nakatsuka, M.C. Larson, K. Nakahara, Y. Yazawa, M. Okai, K. Uomi. *IEEE J. Select. Topics Quant. Electron.*, **3** (3), 719 (1997).
- [49] S. Tomic, E. O'Reilly, R. Fehse, S. Sweeney, A. Adams, A. Andreev, S. Choulis, T. Hosea, H. Riechert. *IEEE J. Select. Topics Quant. Electron.*, **9** (5), 1228 (2003).
- [50] A. Egorov, D. Bernklau, B. Borchert, S. Illek, D. Livshits, A. Rucki, M. Schuster, A. Kaschner, A. Hoffmann, Gh. Dumitras, M. Amann, H. Riechert. *J. Cryst. Growth*, **227–228** (1–4), 545 (2001).
- [51] H. Riechert, A.Yu. Egorov, D. Livshits, B. Borchert, S. Illek. *Nanotechnology*, **11** (4), 201 (2000).

- [52] R. Johnson, V. Blasingame, J. Tatum, B.S. Chen, D. Mathes, J. Orenstein, T.Y. Wang, J. Kim, Ho-Ki Kwon, J.H. Ryou, G. Park, E. Kalweit, H. Chanhvongsak, M. Ringle, T. Marta, J. Gieske. Proc. SPIE, **4994**, 222 (2003).
- [53] G.L. Bir, G.E. Pikus. *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors* (N. Y., Wiley, 1974).
- [54] J.D. Cooper, A. Valavanis, Z. Ikončić, P. Harrison, J.E. Cunningham. J. Appl. Phys., **108** (11), 113109 (2010).
- [55] C. Jirauschek. IEEE J. Quant. Electron., **45** (9), 1059 (2009).
- [56] А.В. Бабичев, Е.В. Пирогов, М.С. Соболев, Д.В. Денисов, Н.А. Фоминых, А.И. Баранов, А.С. Гудовских, И.А. Мельниченко, П.А. Юнин, В.Н. Неведомский, М.В. Токарев, Б.Я. Бер, А.Г. Гладышев, Л.Я. Карачинский, И.И. Новиков, А.Ю. Егоров. ФТП, **56** (10), 1002 (2022).
- [57] A.V. Babichev, E.V. Pirogov, M.S. Sobolev, D.V. Denisov, N.A. Fominykh, A.I. Baranov, A.S. Gudovskikh, I.A. Melnichenko, P.A. Yunin, V.N. Nevedomsky, M.V. Tokarev, B.Ya. Ber, A.G. Gladyshev, L.Ya. Karachinsky, I.I. Novikov, A.Yu. Egorov. Semiconductors, **56** (10), 782 (2022).
- [58] M.M. Al-Jassim, M.M. Goral, J.P. Sheldon, P. Jones, K.M. MRS Online Proc. Libr. (OPL), **144**, 183 (1988).
- [59] A.M. Mintairov, T.H. Kosel, J.L. Merz, P.A. Blagnov, A.S. Vlasov, V.M. Ustinov, R.E. Cook. Phys. Rev. Lett., **87** (27), 277401 (2001).
- [60] A. Babichev, S. Blokhin, E. Kolodeznyi, L. Karachinsky, I. Novikov, A.Egorov, S.C. Tian, D. Bimberg. Photonics, **10** (3), 268 (2023).
- [61] J. Jewell, L. Graham, M. Crom, K. Maranowski, J. Smith, T. Fanning, M. Schnoes. Phys. Status Solidi C, **5** (9), 295 (2008).

Редактор Г.А. Оганесян

## Simulation of the energy-band structure of superlattice of quaternary alloys of diluted nitrides

A.S. Dashkov<sup>1</sup>, N.A. Kostromin<sup>2</sup>, A.V. Babichev<sup>3</sup>,  
L.I. Goray<sup>1</sup>, A.Yu. Egorov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Alferov University,  
194021 St. Petersburg, Russia

<sup>2</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,  
195251 St. Petersburg, Russia

<sup>3</sup> ITMO University,  
197101 St. Petersburg, Russia

**Abstract** The paper describes an algorithm for computing the interband transition energy for superlattices of quaternary solid solutions of diluted nitrides. Using the described method, the authors have conducted several numerical simulations of test structures with InGaAsN quantum wells for the method verification using experimental data and comparison with other approaches. Simulation results showed the validity of the used approach. The hybridization parameter estimation method for Indium mole-fraction below 30% is presented. Based on simulation results, the authors propose InGaAs/GaAsN superlattices' parameters for the implementation of the source emitting in the 1.3  $\mu\text{m}$  spectral range.