

В.І. Бойчук, І.В. Білінський, Р.І. Пазюк

Коефіцієнт міжзонного поглинання світла надграткою квантових точок $\text{InAs}/\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ при низьких температурах

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, вул. Стрийська, 3, Дрогобич, 82100, Україна, ri.pazyuk@gmail.com

У роботі розглянуто надграткову систему $\text{InAs}/\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ квантових точок малих розмірів (до 10 нм) кубічної форми. Для надграток різних вимірностей обчислено закони дисперсії для електронних та діркових підзон. Досліджено залежність коефіцієнта міжзонного поглинання від частоти світла, розмірів квантових точок та відстаней між ними. Показано, що вимірність надгратки впливає на форму смуг поглинання, збільшення відстані між квантовими точками спричиняє звуження піків поглинання для всіх трьох типів надгратки.

Ключові слова: квантова точка, надгратка, електронні стани, коефіцієнт поглинання.

Стаття постуила до редакції 07.04.2017; прийнята до друку 05.06.2017.

Вступ

Надгратки на плоских квантових ямах вже достатньо добре досліджені і знайшли своє застосування у приладах оптоелектроніки [1, 2]. Зокрема, лазери на квантових ямах $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ широко використовуються для волоконного зв'язку. Досить великі порогові струми, низька робоча температура і невисока температурна стабільність таких лазерів не завжди відповідають тим вимогам, що потрібні для високошвидкісних комунікаційних пристроїв. Прогрес у виготовленні багатощарових структур самоорганізованих квантових точок сполук A_3B_5 , що досить однорідні за розмірами та за формою і характеризуються великою поверхневою густиною, привів до створення напівпровідникових лазерів на квантових точках. Такі лазери можуть генерувати випромінювання з актуальною довжиною хвилі $\lambda = 1,3$ мкм з надзвичайно низькими пороговими струмами і великою вихідною потужністю. Надзвичайно важливими для високошвидкісної обробки сигналів є оптичні підсилювачі на основі квантово-точкових структур. Вони дозволяють проводити обробку сигналів зі швидкістю понад 40 Гбіт/с.

Для подальшого удосконалення оптоелектронних приладів необхідно проводити як експериментальні, так і теоретичні дослідження фізичних властивостей структур просторово впорядкованих квантових точок (КТ). Тому надгратки квантових точок привертають

велику увагу дослідників протягом останніх років. Автори роботи [3] розглянули надгратки кубічних квантових точок GaAs/AlAs , які широко застосовуються в інфрачервоних фотоприймачах. Використавши наближення обвідної функції в моделі Кроніга-Пенні, автори показали, що врахування інтегралів перекриття при зменшенні відстаней між КТ приводить до утворення тривимірних мінізон. Однак, автори обмежились лише розглядом енергетичного спектра цих електронних 3D-підзон, констатувавши, що він чутливіший до параметрів надгратки кубічних квантових точок (НККТ), ніж до форми самих КТ.

У роботі [4] методом приєднаних плоских хвиль виконано розрахунок електронної зонної структури у надгратці сферичних квантових точок (НСКТ) в наближенні ефективних мас. Досліджено, як впливають розміри КТ та відстані між ними на положення енергетичних зон та їх ширину.

Теоретичне обґрунтування електронної зонної структури над гратки GaAs/AlAs з рівномірно розподіленими тунельно-зв'язаними КТ проведено в [5, 6]. Отримано залежність енергії електрона від хвильового вектора. Досліджено також оптичні властивості НСКТ. Зокрема, обчислено матричний елемент та густину станів міжпідзонних переходів з основного в перші збуджені стани електрона НГ для різних радіусів КТ та відстаней між ними. Отримані обчислення дали змогу дослідити залежність коефіцієнта міжпідзонного поглинання гетеро систем $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ з періодично розташованими

сферичними квантовими точками від частоти падаючого світла.

Дослідження оптичних властивостей систем невазємодіючих квантових точок [7, 8] показали, що надзвичайно важливим параметром є середній розмір квантових точок. Поряд з цим важливу роль відіграє також і їх форма. Очевидно, що для тунельно-зв'язаної системи квантових точок їх розмір, форма та відстань між точками будуть важливими параметрами. У запропонованій роботі розглянуто надграткову систему $\text{InAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ квантових точок малих розмірів (до 10 нм) кубічної форми. Для надграток різних вимірностей обчислено закони дисперсії для електронних та діркових підзон. Досліджено залежність коефіцієнта міжзонного поглинання від частоти світла, розмірів квантових точок та відстаней між ними.

I. Постановка задачі

Дослідження спектрів поглинання є одним з важливих методів визначення фізичних характеристик гетеро систем з квантовими точками. Для їх визначення розглянемо систему просторово впорядкованих кубічних квантових точок однакового розміру, що знаходяться у матриці, як показано на рис.1, – надгратку кубічних квантових точок.

Якщо $a_1 = a_2 = a_3$, то НККТ будемо називати 3D-надграткою, коли ж $a_3 = a_1 = a_2$ – 2D-надграткою, а для $a_3 = a_1 = a_2$ – 1D-надграткою. Зрозуміло, що вектор трансляції над гратки:

$$\vec{n} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3,$$

де n_i ($0, \pm 1, \pm 2, \dots$), \vec{a}_i ($i = 1, 2, 3$) – основні вектори трансляції, які за напрямками збігаються з осями декартової системи координат.

Теоретичне дослідження наногетеросистеми широкозонних напівпровідників призводить до потреби розв'язання рівняння Шредінгера для електрона. Для розв'язання задачі можна скористатися методами: скінчених елементів [9], приєднаних плоских хвиль [10] чи псевдопотенціалу [11]. Розглянемо надгратку з напівпровідникових квантових точок малих розмірів (2 - 10 нм), для яких характерне значне розмірне квантування квазічастинок. Через те при визначенні енергій та

хвильових функцій не лише електронів, але й дірок (важких дірок) використаємо однозонне наближення та наближення ефективної маси.

Рівняння Шредінгера, що описує рух однієї зарядженої частинки (електрона чи дірки) в НККТ, можна записати в наступному вигляді:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m(\vec{r})} \nabla + V(\vec{r}) \right] \Psi_v(\vec{r}) = E \Psi_v(\vec{r}) \quad (1)$$

$$\text{де } V(\vec{r}) = \begin{cases} 0, & \begin{cases} n_1 a_1 \leq x \leq n_1 a_1 + L \\ n_2 a_2 \leq y \leq n_2 a_2 + L \\ n_3 a_3 \leq z \leq n_3 a_3 + L \end{cases} \\ U_0, & \text{в іншій області простору,} \end{cases}$$

періодичний потенціал, який відповідає нескінченній послідовності кубічних квантових точок, $m(\vec{r})$ – ефективна маса частинки.

Використавши для потенціальної енергії частинки наближення, запишемо потенціал $V(\vec{r})$ у вигляді суми трьох незалежних періодичних функцій координат x, y і z :

$$V(\vec{r}) = V(x) + V(y) + V(z) \quad (2)$$

Такий вибір потенціалу дозволяє розділити рух зарядженої частинки по трьох осях координат. Тривимірне рівняння Шредінгера (1) в цьому випадку переписеться у вигляді трьох ідентичних одновимірних рівнянь. Тоді об'єднана хвильова функція рівняння (1) може бути представлена як добуток трьох одновимірних власних функцій:

$$\Psi_v(\vec{r}) = \Psi_{v_1, v_2, v_3}(x_1, x_2, x_3) = \Phi_{v_1}(x_1) \cdot \Phi_{v_2}(x_2) \cdot \Phi_{v_3}(x_3), \quad (3)$$

а енергія, як сума відповідних складових

$$E_v = E_{v_1} + E_{v_2} + E_{v_3} \quad (4)$$

Для визначення E_{v_i} та Φ_{v_i} необхідно використати рівняння

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{1}{m(\vec{r})} \frac{\partial}{\partial x_i} + V(x_i) \right] \Phi_{v_i}(x_i) = E_{v_i} \Phi_{v_i}(x_i), \quad (5)$$

$i = 1, 2, 3$

Рівняння (5) відповідають відомій моделі Кроніга-Пенні. Згідно цієї моделі розв'язок рівняння (5) відомий [12] і визначається з відповідних дисперсійних рівнянь в різних областях НГ [3].

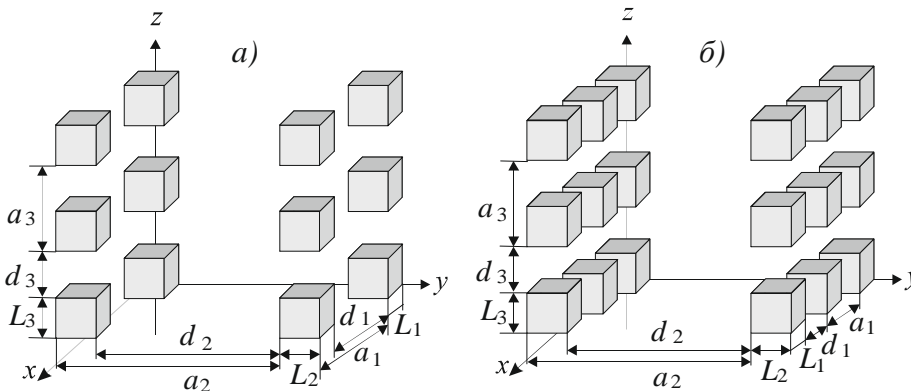


Рис. 1. Геометрична схема 1D-надгратки (а) та 2D-надгратки (б) кубічних квантових точок.

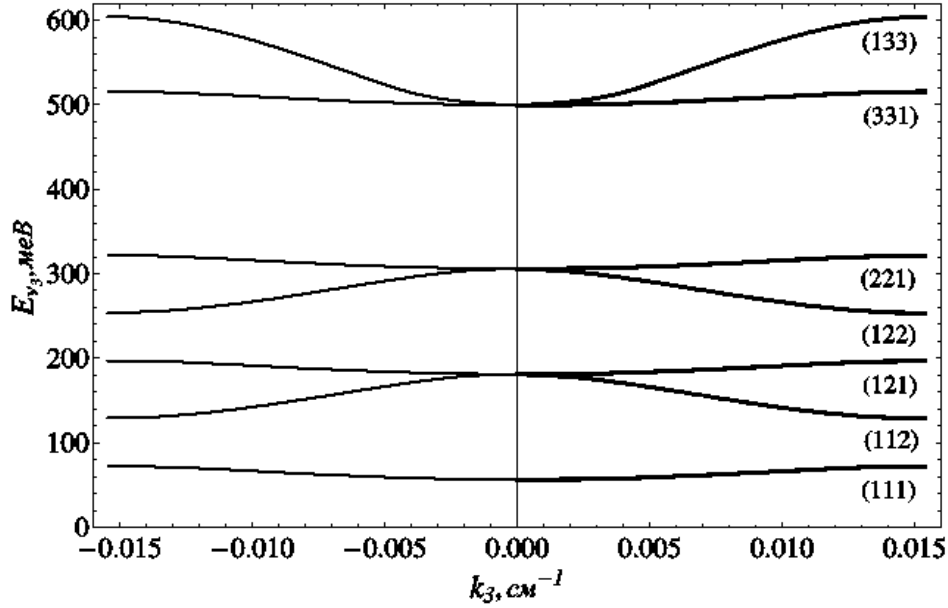


Рис. 2. Енергії електронних станів НККТ $L = 96 \text{ \AA}$, $d = 12 \text{ \AA}$.

Якщо $0 < E_v < U_0$, то дисперсійне рівняння має вигляд:

$$\cos(k_i a_{v_i}) - \cos(\chi_{v_i} L) \operatorname{ch}(\xi_{v_i} d) + \frac{(\chi_{v_i} m_2)^2 - (\xi_{v_i} m_1)^2}{2\chi_{v_i} m_2 \cdot \xi_{v_i} m_1} \sin(\chi_{v_i} L) \operatorname{sh}(\xi_{v_i} d) = 0, \quad (6, a)$$

Коли ж $E_v > U_0$, то

$$\cos(k_i a_{v_i}) - \cos(\chi_{v_i} L) \cos(\xi_{v_i} d_{v_i}) + \frac{(\chi_{v_i} m_2)^2 + (\xi_{v_i} m_1)^2}{2\chi_{v_i} m_2 \cdot \xi_{v_i} m_1} \sin(\chi_{v_i} L) \sin(\xi_{v_i} d_{v_i}) = 0 \quad (6, б)$$

де $\chi_{v_i} = \sqrt{\frac{2m_1(U_0 + E_{v_i})}{\hbar^2}}$, $\xi_{v_i} = \sqrt{\frac{2m_2|E_{v_i}|}{\hbar^2}}$,

m_1, m_2 – ефективні маси квазічастинки всередині та зовні КТ. Отже,

$$E_v(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^3 E_{v_i}(k_i), \quad \mathbf{v} = \{v_1, v_2, v_3\}, \quad (7)$$

Нехай на надгратку КТ падає монохроматична електромагнітна хвиля з векторним потенціалом

$$\mathbf{A} = -\frac{ic}{\omega} \xi \mathbf{A}_0 e^{i(\chi \mathbf{r} - \omega t)} \quad (8)$$

де ξ, χ – вектор поляризації та хвильовий вектор падаючого світла відповідно. Запишемо оператор взаємодії електромагнітної хвилі (8) з електроном у вигляді

$$H' = \frac{e\hbar}{m_0\omega} e^{i(\chi \mathbf{r} - \omega t)} A_0 \left(\xi, \nabla \right). \quad (9)$$

Тут A_0 – амплітуда векторного потенціалу, ω – частота падаючої хвилі. Надалі будемо розглядати випадок лінійно поляризованого світла з вектором поляризації вздовж осі Oz.

Розглянемо ймовірності переходів електрона з валентної зони з квантовими числами початкового стану $\lambda(v, \mathbf{k})$ в кінцевий стан (зона провідності) $\lambda'(c, \mathbf{k}')$, де v, v' – набір квантових чисел дірки та електрона відповідно. Коефіцієнт поглинання, який визначається різницею енергії поглинутого та випроміненого світла [13] запишеться

$$\alpha = \frac{4\pi e\hbar}{Vm_0^2 c n \omega} \sum_{\lambda, \lambda'} \left| \xi J_{\lambda, \lambda'} \right|^2 (f(\lambda) - f(\lambda')) \delta[E_{\lambda'} - E_{\lambda} - \hbar\omega] \quad (10)$$

$$f(\lambda) = \frac{1}{\exp \frac{E_{\lambda} - E_F}{k_0 T} + 1}, \quad f(\lambda') = \frac{1}{\exp \frac{E_F - E_{\lambda'}}{k_0 T} + 1}$$

функції розподілу носіїв заряду у відповідних зонах. У дипольному наближенні та наближенні обвідної функції матричний елемент квантового переходу задається виразом:

$$J_{\lambda, \lambda'} = \int \Psi_{\lambda'}^* U_{\lambda'}^* \frac{\partial}{\partial z} (\Psi_{\lambda} U_{\lambda}) dV \quad (11)$$

U_{λ} – блохівська оцилююча функція кристалу КТ в т. $k=0$.

Коефіцієнт поглинання НККТ (10) при низьких (гелієвих) температурах за умови повного заселення електронами валентної зони і вільної зони провідності прийме вигляд

$$\alpha = \frac{4\pi e\hbar K}{Nm_0^2 c n_0 \omega} \sum_{\lambda, \lambda'} \sum_k \left| I_{\lambda, \lambda'}(\mathbf{k}) \right|^2 \delta[E_{\lambda'}(\mathbf{k}) - E_{\lambda}(\mathbf{k}) - \hbar\omega] \quad (12)$$

де $I_{\lambda, \lambda'}^2(\mathbf{k}) = \left| \int \Psi_{\lambda'}^*(\mathbf{r}) \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) dV \right|^2$ – квадрат матричного елемента інтеграла перекриття,

$$K = \left| \int_{\Omega} U_c^*(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial z} U_v(\mathbf{r}) dV \right|^2$$
 – параметр Кейна.

II. Аналіз отриманих результатів

Конкретні числові розрахунки проведено для надграток кубічних квантових точок гетеросистеми $\text{InAs}/\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ з наступними параметрами:

$$m_{1e} = 0.023 m_0, m_{2e} = (0.023 + 0.044x) m_0, \\ V_e = 0.77 \text{ \AA}$$

$$m_{1h} = 0.55 m_0, m_{2h} = (0.55 + 0.04x) m_0, V_h = 0.33 \text{ \AA}$$

Розглядаючи 3D-надгратку з кубічними квантовими точками вважаємо розміри КТ $L = 96 \text{ \AA}$ та відстані між ними в різних напрямках ϵ

однаковими $d_x = d_y = d_z = d$. Коли розглядається 2D-надгратка, то повинні виконуватися умови, що $d_3 = d_1 = d_2$, і для 1D-надгратки: $d_3 = d_1 = d_2$.

На рис.3 подано залежності коефіцієнту поглинання 3D-НККТ $\text{InAs}/\text{In}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{As}$ від енергії фотона. Розрахунки проводились для квантових точок різних розмірів $L = 96 \text{ \AA}$, 84 \AA , 60 \AA та відстані між ними $d = 12 \text{ \AA}$. З графічних залежностей видно, що для $L = 96 \text{ \AA}$ (крива 1) маємо три смуги поглинання різної амплітуди і ширини, що зумовлено наявністю при таких розмірах відповідної кількості електронних підзон. Тоді як при $L = 84 \text{ \AA}$ (крива 2) та $L = 60 \text{ \AA}$ (крива 3) маємо відповідно дві і одну смуги

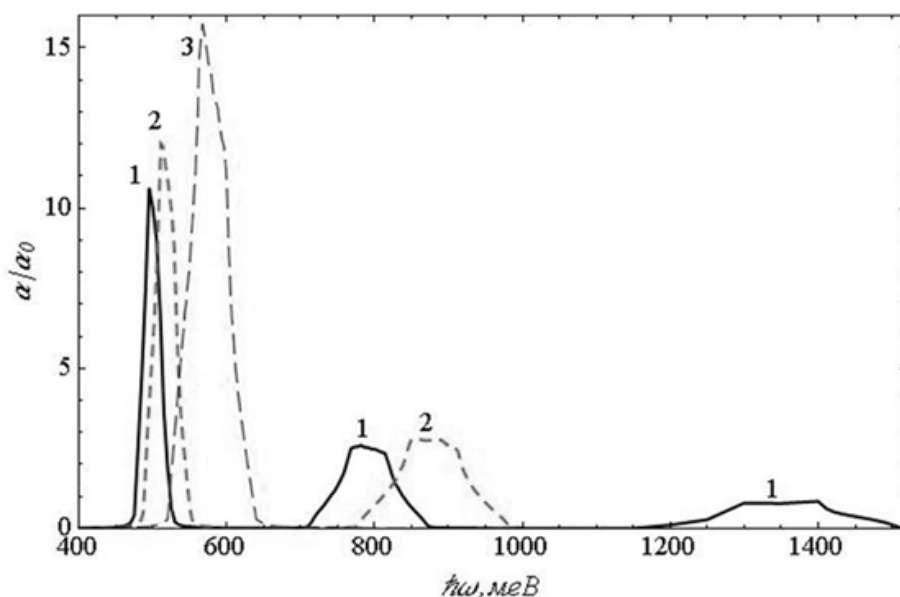


Рис. 3. Коефіцієнт поглинання світла в 3D-НККТ $\text{InAs}/\text{In}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{As}$ для різних розмірів КТ: $L = 96 \text{ \AA}$ – крива 1, $L = 84 \text{ \AA}$ – крива 2, $L = 60 \text{ \AA}$ – крива 3 та відстані між ними $d = 12 \text{ \AA}$.

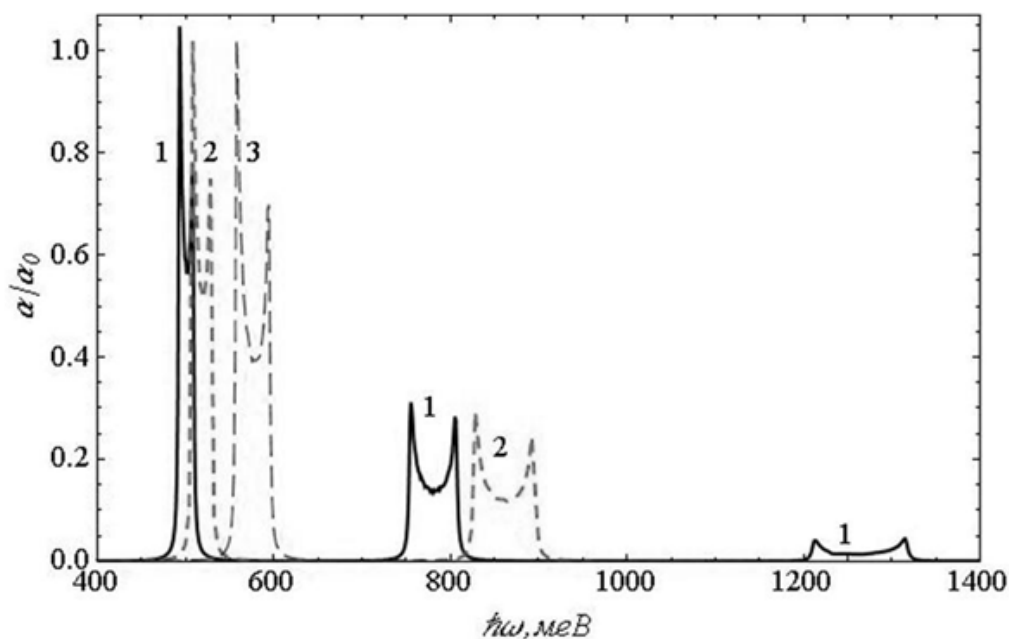


Рис. 4. Коефіцієнт поглинання світла в 1D-НККТ $\text{InAs}/\text{In}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{As}$ для різних розмірів КТ: $L = 96 \text{ \AA}$ – крива 1, $L = 84 \text{ \AA}$ – крива 2, $L = 60 \text{ \AA}$ – крива 3 та відстані між ними $d = 12 \text{ \AA}$.

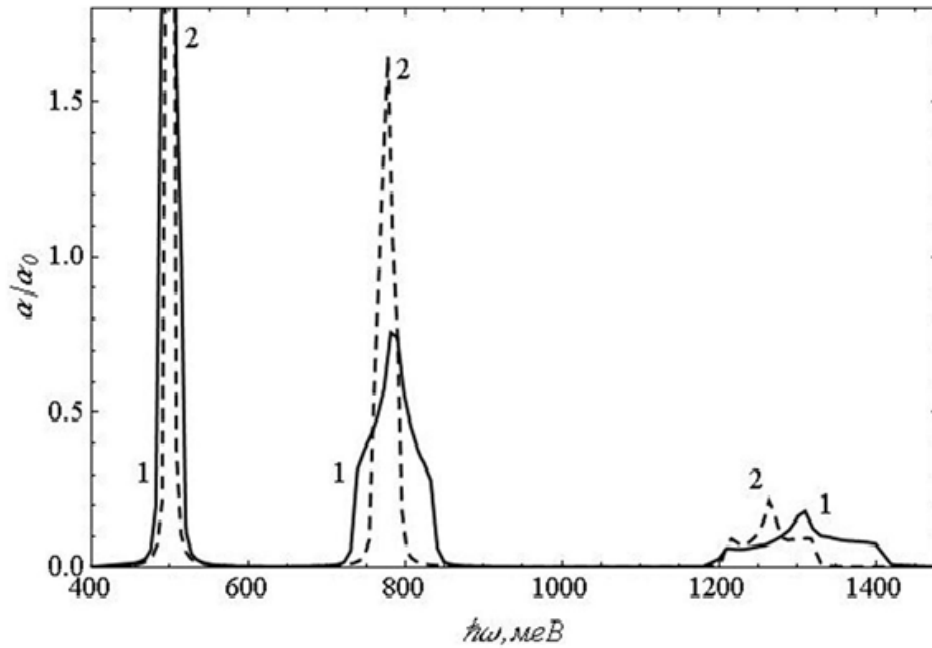


Рис. 5. Коефіцієнт поглинання світла в 2D-НККТ InAs/In_{0.85}Ga_{0.15}As для $L = 96 \text{ \AA}$ при різних відстанях між ними: $d = 12 \text{ \AA}$ – крива 1, $d = 24 \text{ \AA}$ – крива 2.

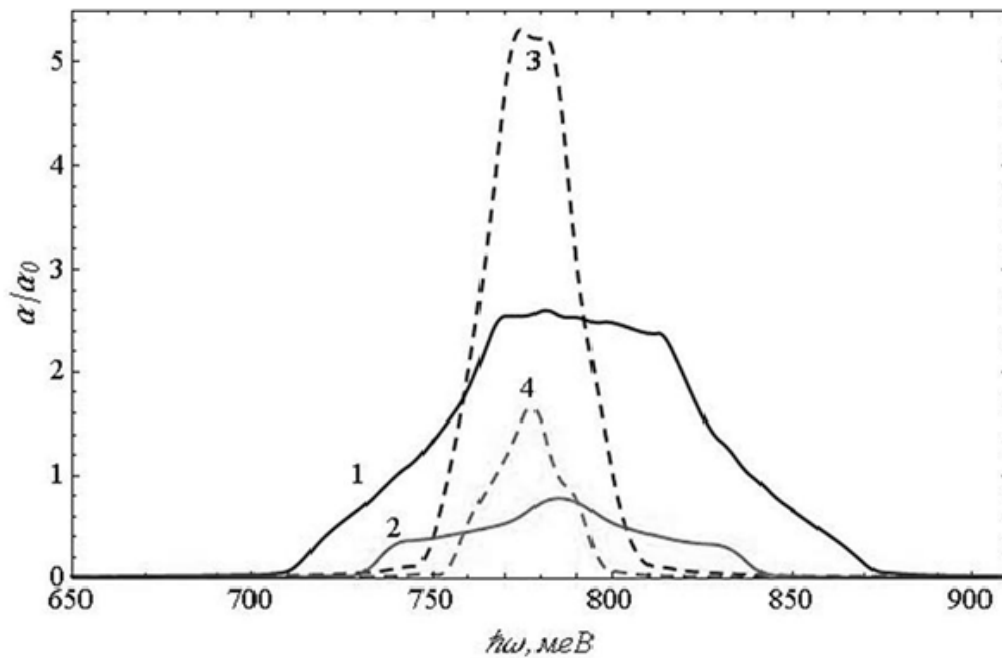


Рис. 6. Коефіцієнт поглинання світла в НККТ InAs/In_{0.85}Ga_{0.15}As різних вимірностей для $L = 96 \text{ \AA}$ при різних відстанях між ними: $d = 12 \text{ \AA}$ 3D-НККТ – крива 1, 2D-НККТ – крива 2; $d = 24 \text{ \AA}$ 3D-НККТ – крива 3, 2D-НККТ – крива 4.

поглинання. Характерною особливістю кривих є наявність максимумів всередині смуги поглинання, як і для 2D-НККТ (рис. 3). При зменшенні розміру КТ спостерігається збільшення амплітуди коефіцієнта поглинання, розширення смуг та зсуву їх у сторону більших частот падаючого світла. Аналогічна картина спостерігається і для 1D-НККТ (рис. 4), але на відміну від тривимірної ґратки максимуми коефіцієнта поглинання досягаються на краях кожної з наявних смуг поглинання.

Зменшення вимірності над ґратки отримуємо за

рахунок значного збільшення відстаней між КТ у заданих напрямках при сталих розмірах квантових точок, коли тунелювання зарядів в цих напрямках стає неможливим. На рис. 5 наведені результати обчислень коефіцієнта поглинання для двовимірної надґратки кубічних квантових точок з розмірами $L = 96 \text{ \AA}$ при різних відстанях d між ними. Як видно з кривих залежностей, незначне збільшення відстані d від 12 \AA (крива 1) до 24 \AA (крива 2) зменшує ширини електронних та діркових підзонв КТ і, як наслідок, звуження діапазону частот поглинутих фотонів

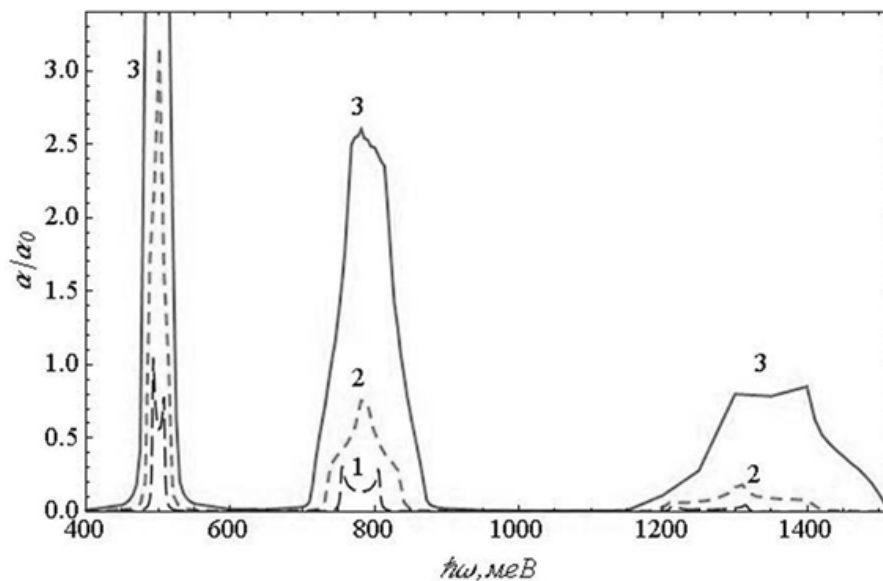


Рис. 7. Коефіцієнт поглинання світла в НККТ InAs/In_{0.85}Ga_{0.15}As з розмірами $L = 96 \text{ \AA}$, $d = 12 \text{ \AA}$ для різних вимірностей: 1D-НККТ – крива 1, 2D-НККТ – крива 2; 3D-НККТ – крива 3.

світла. При цьому максимуми смуг поглинання зсуваються в сторону нижчих частот з одночасним ростом абсолютних значень коефіцієнта поглинання. Це яскраво проявляється і на прикладі 3D-НККТ (криві 1, 3 на рис. 6). Тут для аналізу вибрана одна (центральна) з трьох областей поглинання, характерних для даних розмірів КТ ($L = 96 \text{ \AA}$). Порівняння коефіцієнтів поглинання надграток різних вимірностей (рис. 6), 3D- (криві 1, 3) та 2D- (криві 2, 4), показує звуження смуги поглинання зі зменшенням вимірності НККТ і збереження частоти падаючого світла, при якому досягаються максимуми коефіцієнта поглинання. На рис. 7 представлена повна картина залежностей коефіцієнта поглинання від енергії фотона падаючого світла для надграток всіх вимірностей.

Висновки

Проведені нами обчислення коефіцієнта міжзонного поглинання над гратки InAs/In_{0.85}Ga_{0.15}As дають можливість зробити наступні висновки.

Спектр поглинання НККТ $L=(60-100) \text{ \AA}$ характеризуються одним яскраво вираженим піком та (залежно від розміру КТ) одним або двома піками меншої величини, що зсунуті у короткохвильову частину спектру.

Вимірність надгратки впливає на форму смуг поглинання. Найбільша різниця між формами смуг для 3D- та 1D-надграток.

Збільшення відстані між квантовими точками спричиняє звуження піків поглинання для всіх трьох типів надгратки.

Бойчук В.І. - доктор фізико-математичних наук, професор, директор Інституту фізики, математики, економіки та інноваційних технологій;

Білинський І.В. - кандидат фізико-математичних наук, доцент, завідувач кафедри теоретичної і прикладної фізики та комп'ютерного моделювання;

Пазюк Р.І. - старший викладач кафедри інформатики та обчислювальної математики.

- [1] P. Yu, M. Cardona, Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties (Springer, Berlin, 2010).
- [2] R. Tsu, Superlattice to nanoelectronics (Oxford, Elsevier, 2010).
- [3] F. Kanouni, A. Brezini, N. Sekkel, A. Saidane, D. Chalabi, A. Mostefa, Journal of New Technology and Materials JNTM 01(00), 55 (2011).
- [4] В.А. Головацький, Науковий вісник Чернівецького університету. Фізика. Електроніка 92, 9 (2000).
- [5] Н.В. Ткач, Ю.А. Сеги, Физ. техн. полупр. 45, 387 (2011).
- [6] M.V. Tkach, Yu.O. Seti, O.M. Voitsekhivska, G.G. Zegrya, Rom. J. Phys. 57, 620 (2012).
- [7] V.I. Boichuk, I.V. Bilynskyi, O.A. Sokolnyk, I.O. Shakleina, Condensed Matter Physics 16(3) 33702: 1 (2013).
- [8] V.I. Boichuk, I.V. Bilynskyi, R.I. Pazyuk, Actual problems of semiconductor physics. VIII International School-Conference (Publishing House "UKRPOL" Ltd., Drohobych, 2013), p.7.
- [9] M.A. Cusack, P.R. Briddon, and M. Jaros, Phys. Rev., B 54, R2300 (1996).
- [10] C. Goffaux, V. Lousse, and J.P. Vigneron, Phys. Rev., B 62, 7133(2000).
- [11] Jianping Wang, Ming Gong, Guang-Can Guo, Lixin He, Journal of Physics: Condensed Matter. 24(47), 475302(12) (2012).

[12] G. Bastard, Phys. Rev. B25, 7584 (1982).

[13] А.С. Давыдов, Квантовая механика (Наука, Москва, 1972).

V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, R.I. Pazyuk

Coefficient of Interband Light Absorption by InAs/Ga_xIn_{1-x}As Quantum Dot Superlattice at Low Temperatures

Drohobych Ivan Franko State Pedagogical University, 3 Stryiska St, Drohobych, 82100, Ukraine, ri.pazyuk@gmail.com

In the paper the InAs/Ga_xIn_{1-x}As superlattice system of small size cubic QDs (10 nm) has been considered. Dispersion relations for electron and hole subbands have been calculated for superlattices of different dimensionality. The dependences of the interband absorption coefficient on light frequency, quantum dot size and interdot distance have been researched. It is shown, that the dimension of the superlattice has influence on the shape of the absorption bands and the increasing of the distance between quantum dots is followed by narrowing of the absorption peaks for all three superlattice types.

Key words: quantum dot, superlattice, electronic states, absorption coefficient.