

Міжзонне поглинання світла в надґратках кубічних квантових точок сполук $\text{As}_x\text{V}_{1-x}$

В.І. Бойчук, І.В. Білинський*, Р.І. Пазюк***

email: ri.pazyuk@gmail.com

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка
*кафедра теоретичної і прикладної фізики та комп'ютерного моделювання

**кафедра інформатики та обчислювальної математики

У роботі розглянуто надґраткову систему $\text{InAs}/\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ квантових точок малих розмірів (до 10 нм) кубічної форми. Для надґраток 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.

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

ВСТУП

Надґратка – це періодична структура, що складається з тонких напівпровідникових шарів, які чергуються в одному напрямі. Вона характеризується, крім періодичного потенціалу кристалічної ґратки, додатковим потенціалом, зумовленим чергуванням шарів напівпровідників. Товщина кожного з шарів велика у порівнянні з міжатомними відстанями, але мала у порівнянні з характерною довжиною вільного пробігу носіїв струму. Наявність додаткової модуляції потенціалу у надґратках (НГ) суттєво змінює зонну енергетичну структуру вихідних напівпровідників. За способом створення періодичного потенціалу НГ поділяють на декілька типів. Найбільш розповсюдженими є композиційні та леговані надґратки. Композиційні НГ являють собою епітаксійно вирощені шари різних за складом напівпровідників, що чергуються, з близькими сталими ґратки. У легованих НГ періодичний потенціал утворений чергуванням шарів n - і p -типів одного і того ж напівпровідника. Ці шари можуть бути відокремлені один від одного нелегованими шарами (n ірі-кристали).

За останні роки появилось багато робіт, присвячених перспективам нанотехнологій. Перспективна і здатна привести до технологічних проривів лише така наукова діяльність, в якій ведеться робота з окремим об'єктом, що має нанометрові розміри, або колек-

тивом таких об'єктів, в якому кожен окремий нанооб'єкт важливий індивідуально.

До таких наноструктури можна віднести надґратки квантових точок, які за останні роки інтенсивно досліджуються як експериментально, так і теоретично. Так автори [1] розглянули надґратки кубічних квантових точок (НКТ) GaAs/AlAs , які мають широкі перспективи використання в інфрачервоних фотоприймачах. Застосувавши наближення обвідної функції в моделі Кроніґа-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 НКТ, ніж до форми самих КТ.

У роботі [2] виконано розрахунок електронної зонної структури у надґратці сферичних квантових точок (НСКТ) в наближенні ефективних мас методом приєднаних плоских хвиль. Досліджено як впливають розміри КТ та відстані між ними на положення енергетичних зон та їх ширину.

Теоретичне обґрунтування електронної зонної структури надґратки GaAs/AlAs з рівномірно розподіленими тунельно-зв'язаними КТ проведено в [3]. Отримано закони дисперсії енергії електрона як функції від хвильового вектора. Досліджено також оптичні вла-

стивості НСКТ. Зокрема, обчислено матричний елемент та густина 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 гетеросистем GaAs/Al_xGa_{1-x}As з періодично розташованими сферичними квантовими точками від частоти падаючого світла.

Дослідження оптичних властивостей систем невзаємодіючих квантових точок [4,5] показали, що надзвичайно важливими параметрами 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 надґраткову систему InAs/Ga_xIn_{1-x}As квантових точок малих розмірів (до 10 нм) кубічної форми. Для надґраток 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.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Матеріал змістової частини повинен бути логічно зв'язаним, викладеним чітко та ясно, у науковому стилі, а також мати відповідну структуру. Потрібно пам'ятати, що саме змістова частина визначає обсяг статті. Орієнтовний об'єм статті з використанням цього шаблону:

Дослідження спектрів поглинання є одним з основних методів визначення фізичних характеристик гетеросистем з квантовими точками. Розглянемо систему просторово впорядкованих кубічних квантових точок однакового розміру, що знаходяться у матриці, як показано на рис.1, – надґратку кубічних квантових точок (НККТ). Якщо $a_1 = a_2 = a_3$, то НККТ будемо називати 3D-надґраткою, коли ж $a_3 = a_1 \ll a_2$ – 2D-надґраткою, а для $a_3 \ll a_1 = a_2$ – 1D-надґраткою. Зрозуміло, що вектор трансляції надґратки

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

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.

Актуальні проблеми фізики, математики та інформатики. № 8, 2016

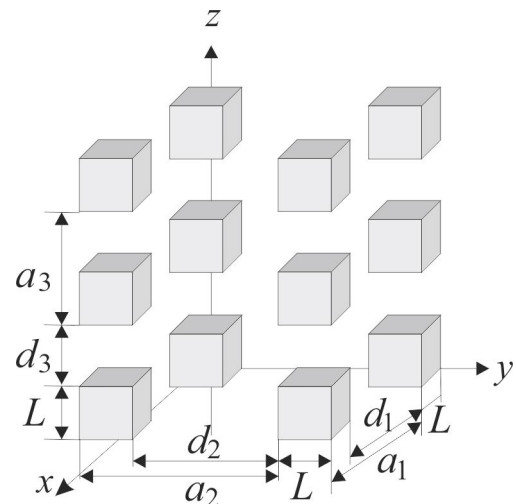


Рисунок 1. Геометрична схема надґратки кубічних квантових точок.

Нас цікавлять наногетеросистеми широконісних напівпровідників. Теоретичне дослідження таких систем часто призводить до потреби розв'язання рівняння Шредінгера для електрона. Задачу можна розв'язувати різними методами: скінчених елементів [6], приєднаних плоских хвиль [7] чи псевдопотенціалу [8] та ін. Ми обмежимося дослідженнями НККТ з малими розмірами (2-10 нм) напівпровідникових квантових точок, для яких характерне значне розмірне квантування як електронів, так і дірок. 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, яке описує рух однієї зарядженої частинки (електрона чи дірки) в НККТ, можна записати в наступному вигляді:

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

Періодичний потенціал $V(\vec{r})$, який відповідає нескінченній послідовності кубічних квантових точок,

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} 0, & \begin{cases} n_1 a_1 \leq x \leq n_1 a_1 + L \\ n_2 a_2 \leq y \leq n_2 a_2 + L \\ n_3 a_3 \leq z \leq n_3 a_3 + L \end{cases} \\ U_0, & \text{в іншій області простору,} \end{cases} \quad (2)$$

$m(\vec{r})$ – ефективна маса частинки.

Рівняння Шредінгера (1) точно розв'язати неможливо. Спростимо вираз (2) для потенціальної енергії частинки і наближено зобразимо $V(\vec{r})$ у вигляді суми трьох незалежних періодичних функцій координат x, y, z :

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

Для розрахунку енергетичного спектра електронів (дірок) у надґратці необхідно

розв'язати рівняння Шредінгера з періодичним потенціалом

$$V(x_i) = \begin{cases} 0, & n_i a_i \leq x_i \leq n_i a_i + L \\ U_0, & n_i a_i + L \leq x_i \leq (n_i + 1) a_i \end{cases}, \quad (3)$$

де $i = 1, 2, 3$; $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$. 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 обв'язна хвильова функція рівняння (1) може бути представлена як добуток трьох одновимірних власних функцій:

$$\Psi_v(\vec{r}) = \Psi_{v_1, v_2, v_3}(x_1, x_2, x_3) = \prod_{i=1}^3 \varphi_{v_i}(x_i), \quad (4)$$

а енергія $E_v = E_{v_1} + E_{v_2} + E_{v_3}$. Для визначення E_{v_i} та φ_{v_i} необхідно використати рівняння

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{1}{m(\vec{r})} \frac{\partial}{\partial x_i} + V(x_i) \right] \varphi_{v_i}(x_i) = E_{v_i} \varphi_{v_i}(x_i), \quad i = 1, 2, 3. \quad (5)$$

Рівняння (5) відповідають відомій моделі Кроніга-Пенні. Згідно цієї моделі розв'язок рівняння (5) відомий [9] і визначається з відповідних дисперсійних рівнянь в різних областях НГ.

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

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

Коли ж $E_v > U_0$, то

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

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,

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

Нехай на надрітку КТ падає монохроматична електромагнітна хвиля з векторним потенціалом

$$\vec{A} = -\frac{ic}{\omega} \vec{\xi} A_0 e^{i(\vec{\chi}\vec{r} - \omega t)}, \quad (8)$$

де $\vec{\xi}, \vec{\chi}$ – вектор поляризації та хвильовий вектор падаючого світла відповідно. Запишемо оператор взаємодії електромагнітної хвилі (8) з електроном у вигляді

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

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

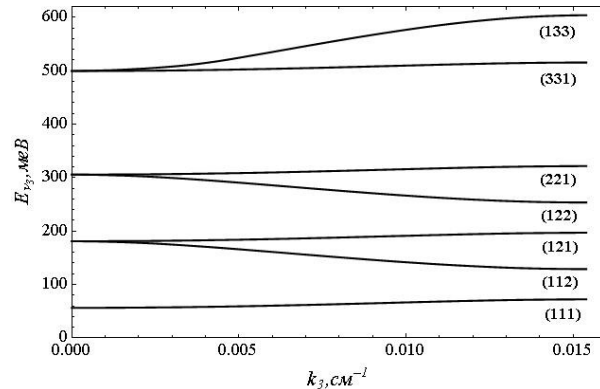


Рисунок 2. Енергії електронних станів НККТ
 $L = 96 \text{ \AA}, d = 12 \text{ \AA}$.

Розглянемо ймовірності переходів електрона з валентної зони з квантовими числами початкового стану $\lambda(v, \vec{k})$ в кінцевий стан (зона провідності) $\lambda'(c, \vec{k}')$, де v, v' – набір квантових чисел дірки та електрона відповідно. Коефіцієнт поглинання, який визначається різницею енергії поглинутого та випроміненого світла [14] запишеться

$$\alpha = \frac{4\pi e\hbar}{Vm_0^2 c n_0 \omega} \sum_{\lambda, \lambda'} |\vec{\xi} \vec{J}_{\lambda\lambda'}|^2 (f(\lambda) - f(\lambda')) \delta[E_{\lambda'} - E_{\lambda} - \hbar\omega] \quad (10)$$

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

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 осцилююча функція кристалу КТ в т. $k=0$.

Коефіцієнт поглинання НККТ (1) при низьких (гелієвих) температурах за умови повного заселення електронами валентної зони і вільної зони провідності прийме вигляд

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

де $I_{\lambda\lambda'}^2(\vec{k}) = \left| \int \psi_{\lambda'}^*(\vec{r}) \psi_{\lambda}(\vec{r}) dV \right|^2$ – квадрат матричного елемента інтеграла перекриття,
 $K = \left| \int_{\Omega} U_c^*(\vec{r}) \nabla_z U_v(\vec{r}) dV \right|^2$ – параметр Кейна.

АНАЛІЗ ОТРИМАНИХ РЕЗУЛЬТАТІВ

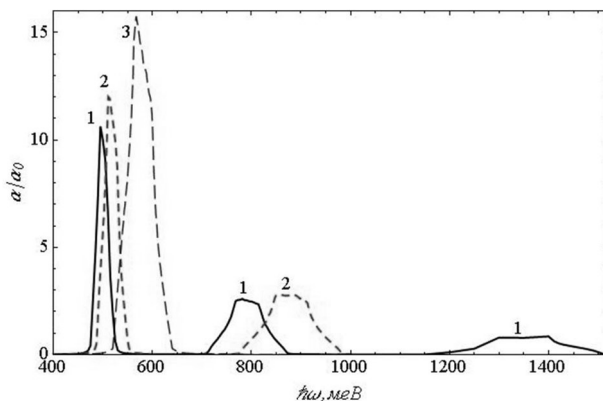
Конкретні числові розрахунки проведено для надграток кубічних квантових точок гетеросистеми $\text{InAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ з наступними параметрами:

$$m_{1e} = 0.023 m_0, \quad m_{2e} = (0.023 + 0.044x) m_0,$$

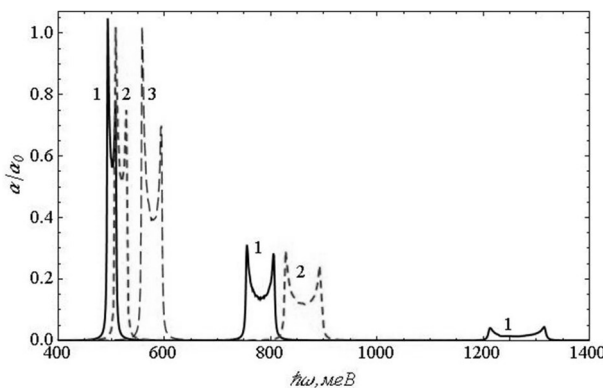
$$V_e = 0.77 \text{ \AA}, \quad m_{1h} = 0.55 m_0,$$

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

Розглядаючи 3D-надгратку з кубічними квантовими точками вважаємо розміри КТ $L = 96 \text{ \AA}$ та відстані між ними в різних напрямках є однаковими $d_x = d_y = d_z = d$. Коли розглядається 2D-надгратка, то повинні виконуватися умови, що $d_3 = d_1 \ll d_2$, і для 1D-надгратки: $d_3 \ll d_1 = d_2$.

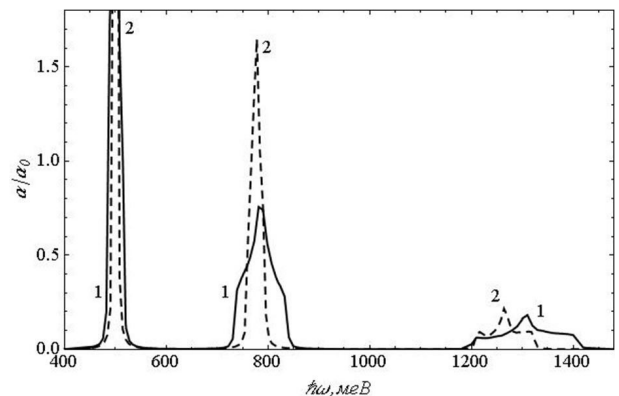


Рисунки 3. Коефіцієнт поглинання світла в 3D-НККТ $\text{InAs}/\text{In}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{As}$ для різних розмірів КТ: $L=96 \text{ \AA}$ – крива 1, $L=84 \text{ \AA}$ – крива 2, $L=60 \text{ \AA}$ – крива 3 та відстані між ними $d=12 \text{ \AA}$.



Рисунки 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 $d=12 \text{ \AA}$.

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 $L=96 \text{ \AA}$, $84 \text{ \AA}$, $60 \text{ \AA}$ 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 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.



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

Зменшення вимірності надгратки 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 надгратки 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 $12 \text{ \AA}$ (крива 1) до $24 \text{ \AA}$ (крива 2) зменшує ширини підзон носіїв струму (електронів, дірок) в КТ і, як наслідок, звуження діапазону частот поглинутих фотонів світла. При цьому максимуми смуг поглинання зсуваються в сторону нижчих частот з одночасним ростом абсолютних значень коефіцієнта поглинання.

ВИСНОВКИ

У роботі досліджено залежність міжзонного поглинання надгратки $\text{InAs}/\text{Ga}_{0.15}\text{In}_{0.85}\text{As}$ квантових точок кубічної форми. Розглянуто випадок трьох типів надгратки 3D-, 2D- та 1D-вимірності. Розміри квантових точок є малими (6-10 нм), тому в системі існує одна, дві або три підбар'єрні електронні підзони, а кількість діркових підзон значно більша.

Обчислення коефіцієнта поглинання світла за рахунок квантового переходу електрона з підзон валентної зони на підзони зони провідності показало, що

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

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

в) збільшення відстані між квантовими точками спричиняє звуження піків поглинання для всіх трьох типів надгратки.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

[1] F. Kanouni, A. Brezini, N. Sekkel, A. Saidane, D. Chalabi, A. Mostefa Journal of New

Technology and Materials JNTM Vol. 01, N°00 (2011) p.55-58.

[2] Головацький В.А. Науковий вісник Чернівецького університету. Фізика. Електроніка. 2000. Вип. 92.с.9-10.

[3] Н.В. Ткач, Ю.А. Сети, Физ. техн. полупр. 45, 387 (2011); M.V. Tkach et al. Rom. J. Phys. 57, 620 (2012).

[4] Boichuk, I.V. Bilynskyi, O.A. Sokolnyk, I.O. Shackleina Condensed Matter Physics, 2013, Vol. 16, No 3, 33702: 1–10

[5] Electron states in spherical quantum dot superlattices - V.I. Boichuk, I.V. Bilynskyi, R.I. Pazyuk // Actual Problems of Semiconductor Physics. VIII International School-Conference. June 25-28, 2013. Drohobych: Abstract Book. Publishing House "UKRPOL" Ltd., 2013. – p.7].

[6] M. A. Cusack, P. R. Briddon, and M. Jaros Phys. Rev. B 54, R2300, 1996

[7] C. Goffaux, V. Lousse, and J. P. Vigneron Phys. Rev. B 62, 7133, 2000

[8] Jianping Wang, Ming Gong, Guang-Can Guo, Lixin He Journal of Physics: Condensed Matter, Vol.24, Number 47, pp. 475302-475313(12), 2012

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