

УДК 621.315.592

ДЫРОЧНЫЕ СОСТОЯНИЯ В РАЗМЕРНО КВАНТОВАННОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ПРОВОЛОКЕ С ПОКРЫТИЕМ

М.М. АГАСЯН, А.А. КИРАКОСЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 20 марта 2000 г.)

В рамках метода огибающей функции для модели ступенчатой бесконечно глубокой потенциальной ямы (СБЯ) исследованы дырочные состояния валентной зоны квантовой проволоки круглого сечения. Найдены волновые функции и получено уравнение для определения собственных значений энергии. Исследовано поведение энергетических уровней в СБЯ из $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ в зависимости от концентрации сплава x , радиусов проволоки и покрытия и отношения эффективных масс дырок.

1. Введение

Интенсивное исследование полупроводниковых квантовых наноструктур – квантовых проволок и квантовых точек, и, в первую очередь, их электронных и оптических свойств, имеет первостепенное значение с точки зрения оценки потенциальных возможностей их применения при создании приборов электроники и оптоэлектроники следующего поколения [1,2]. Применение квантовых проволок и квантовых точек в качестве активных областей лазерных диодов существенно улучшает их параметры по сравнению с обычными лазерными диодами или с диодами на квантовых ямах [3-5].

При расчетах различных характеристик наноструктур важное место занимает исследование структуры валентной зоны наноструктуры. В этих исследованиях широко применяется основанный на К-Р-теории [6] метод огибающей функции [7-9]. Основным предположением этой теории является блоховская форма состояний в периодическом поле, т.е. $\Psi_k^j = u_k^j(r)e^{ikr}$, где $u_k^j(r)$ имеет периодичность кристаллической решетки (j – зонный индекс). На краях зон эти функции характеризуются как состояния $|J, J_z\rangle$ углового момента J .

В отличие от однозонной модели [10], состояния валентной зоны, соответствующие легким и тяжелым дыркам, перемешиваются

потенциалом гетероструктуры $V(r)$. При этом валентная огибающая функция представляется в виде суперпозиции базисных состояний $|J, J_z\rangle$:

$$\Psi = \sum_{J, J_z} |J, J_z\rangle F_{J, J_z}(r), \quad (1)$$

где $F_{J, J_z}(r)$ – огибающая функция, а суммирование проводится как по состояниям зоны проводимости ($J=1/2$), так и валентной зоны ($J=3/2$). $|J, J_z\rangle$ и $F_{J, J_z}(r)$ являются функциями пространственных координат, соответствующими различным пространствам состояний, а полная волновая функция (1) – прямой суммой блоховского и огибающего пространств состояний. В гамильтониане $H(k)$ k заменяется оператором $-i\nabla$, действующим на огибающую функцию.

Следует отметить, что анализ цилиндрических квантовых проволок и сферических квантовых точек в рамках приближения многозонной огибающей функции упрощается из-за высокой симметрии этих структур и сепарабельности гетероструктурных потенциалов.

Состояния валентной зоны в квантовых проволоках с круглым сечением и в сферических квантовых точках в рамках приближения бесконечно глубокой потенциальной ямы рассмотрены в [11,12], а в случае конечной ямы – в [9], где проблема определения состояний в валентной зоне сведена к задаче двух тел, т.н. „блоховской“ и „огибающей“ частиц с орбитальными моментами J и L , соответственно, и с „полным орбитальным моментом“ $F = J + L$.

В данной работе исследованы состояния валентной зоны полупроводниковой проволоки из $GaAs$ круглого сечения с покрытием $Ga_{1-x}Al_xAs$ в рамках модели ступенчатой бесконечно глубокой потенциальной ямы. При этом, следуя общепринятому приближению, считается, что блоховские функции как в проволоке, так и в покрытии идентичны.

Гамильтониан четырехкратно вырожденных Γ_8 -состояний валентной зоны можно записать в аксиальном представлении, воспользовавшись набором базисных состояний, состоящим из собственных состояний операторов $\hat{H}$, $\hat{F}_z$ и $\hat{P}_z$, где $\hat{P}_z$ – входящая в огибающую составляющая импульса вдоль оси z проволоки, $\hat{F}_z$ – проекция полного углового момента [13]. В сферическом приближении $\gamma_2 = \gamma_3$, где γ_i – параметры Латтинджера ($i=1,2,3$), гамильтониан задачи принимает блочно-диагональный вид с собственным значением F_z :

$$\hat{H}_{F_z}^{\Gamma_8} = \begin{pmatrix} |3/2\rangle & |1/2\rangle & |-1/2\rangle & |-3/2\rangle \\ \frac{1}{2}\hat{P} & \hat{L} & \hat{M} & 0 \\ \hat{L}^* & \frac{1}{6}\hat{P} + \frac{2}{3}\hat{Q} & 0 & \hat{M} \\ \hat{M}^* & 0 & \frac{1}{6}\hat{P} + \frac{2}{3}\hat{Q} & -\hat{L} \\ 0 & \hat{M}^* & -\hat{L}^* & \frac{1}{2}\hat{P} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где начало отсчета энергии совпадает с потолком валентной зоны массивного материала, и введены следующие обозначения: $|m_{J_z}\rangle$ — компактное обозначение для векторов $|J, m_{J_z}\rangle \otimes |F_z - m_{J_z}\rangle$,

$$\hat{P} = 2 \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 + \gamma_2) \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + 2 \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 - 2\gamma_2) \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad (3)$$

$$\hat{Q} = \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 - 2\gamma_2) \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 + 4\gamma_2) \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad (4)$$

$$\hat{L} = -2\sqrt{3} \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 e^{-i\varphi} \left(i \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \frac{\partial}{\partial z}, \quad (5)$$

$$\hat{M} = -\sqrt{3} \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 e^{-2i\varphi} \left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - 2i \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} + 2i \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (6)$$

m_0 — масса свободного электрона.

2. Расчет энергий дырочных состояний в СБЯ

В рамках модели СБЯ потенциальная энергия дырок в рассматриваемой структуре имеет вид:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r < R_1, \\ -V_0, & R_1 \leq r \leq R_2, \\ -\infty, & r > R_2, \end{cases} \quad (7)$$

где V_0 — величина скачка потенциальной энергии на границе проволоки и покрывающего слоя. Решением уравнения Шредингера с гамильтонианом (2) и потенциалом (7) является функция

$$\Psi_{n,F_z}(r, z) = e^{ik_z z} \begin{cases} \sum_{\alpha} A_{\alpha} \phi_{F_z, \alpha}^w(r, \varphi), & r < R_1, \\ \sum_{\alpha} B_{\alpha} \phi_{F_z, \alpha}^c(r, \varphi), & R_1 \leq r \leq R_2. \end{cases} \quad (8)$$

Законы дисперсии для тяжелых (НН) и легких (ЛН) дырок имеют вид:

$$E_{HH} = \begin{cases} -\hbar^2(\gamma_1 - 2\gamma_2)(k^2 + k_z^2)/2m_0, & r < R_1, \\ -V_0 + \hbar^2(\gamma_1 - 2\gamma_2)(k^2 - k_z^2)/2m_0, & R_1 \leq r \leq R_2, \end{cases} \quad (9)$$

$$E_{LH} = \begin{cases} -\hbar^2(\gamma_1 + 2\gamma_2)(k^2 + k_z^2)/2m_0, & r < R_1, \\ -V_0 + \hbar^2(\gamma_1 + 2\gamma_2)(k^2 - k_z^2)/2m_0, & R_1 \leq r \leq R_2. \end{cases} \quad (10)$$

В проволоке функции $\phi_{F_z, \alpha}^w$ даются выражениями ($\alpha = HH1, HH2, LH1, LH2$):

$$\phi_{F_z, HH1}^w(r, \varphi) = \begin{pmatrix} \frac{k^2 + 4k_z^2}{\sqrt{3}k^2} J_{F_z-3/2}(t) e^{i(F_z-3/2)\varphi} \\ \frac{2k_z}{k} J_{F_z-1/2}(t) e^{i(F_z-1/2)\varphi} \\ J_{F_z+1/2}(t) e^{i(F_z+1/2)\varphi} \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\phi_{F_z, HH2}^w(r, \varphi) = \begin{pmatrix} \frac{2k_z}{k} J_{F_z-3/2}(t) e^{i(F_z-3/2)\varphi} \\ \sqrt{3} J_{F_z-1/2}(t) e^{i(F_z-1/2)\varphi} \\ 0 \\ J_{F_z+3/2}(t) e^{i(F_z+3/2)\varphi} \end{pmatrix}, \quad (11)$$

$$\phi_{F_z, LH1}^w(r, \varphi) = \begin{pmatrix} -\sqrt{3} J_{F_z-3/2}(t) e^{i(F_z-3/2)\varphi} \\ \frac{2k_z}{k} J_{F_z-1/2}(t) e^{i(F_z-1/2)\varphi} \\ J_{F_z+1/2}(t) e^{i(F_z+1/2)\varphi} \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\phi_{F_z, LH2}^w(r, \varphi) = \begin{pmatrix} \frac{2k_z}{k} J_{F_z-3/2}(t) e^{i(F_z-3/2)\varphi} \\ -\frac{k^2 + 4k_z^2}{\sqrt{3}k^2} J_{F_z-1/2}(t) e^{i(F_z-1/2)\varphi} \\ 0 \\ J_{F_z+3/2}(t) e^{i(F_z+3/2)\varphi} \end{pmatrix}, \quad (12)$$

где введено обозначение $t = kr$.

В области покрывающего слоя $\phi_{F_z, \alpha}^e$ даются выражениями

$$\phi_{F_z, HH1}^c(r, \varphi) = \begin{pmatrix} -\frac{k^2 - 4k_z^2}{\sqrt{3}k^2} h_{F_z-3/2}(t) e^{i(F_z-3/2)\varphi} \\ -\frac{2k_z}{k} h_{F_z-1/2}(t) e^{i(F_z-1/2)\varphi} \\ h_{F_z+1/2}(t) e^{i(F_z+1/2)\varphi} \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\phi_{F_z, HH2}^c(r, \varphi) = \begin{pmatrix} \frac{2k_z}{k} h_{F_z-3/2}(t) e^{i(F_z-3/2)\varphi} \\ -\sqrt{3} h_{F_z-1/2}(t) e^{i(F_z-1/2)\varphi} \\ 0 \\ h_{F_z+3/2}(t) e^{i(F_z+3/2)\varphi} \end{pmatrix}, \quad (13)$$

$$\phi_{F_z, LH1}^c(r, \varphi) = \begin{pmatrix} \sqrt{3} h_{F_z-3/2}(t) e^{i(F_z-3/2)\varphi} \\ -\frac{2k_z}{k} h_{F_z-1/2}(t) e^{i(F_z-1/2)\varphi} \\ h_{F_z+1/2}(t) e^{i(F_z+1/2)\varphi} \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\phi_{F_z, LH2}^c(r, \varphi) = \begin{pmatrix} \frac{2k_z}{k} h_{F_z-3/2}(t) e^{i(F_z-3/2)\varphi} \\ \frac{k^2 - 4k_z^2}{\sqrt{3}k^2} h_{F_z-1/2}(t) e^{i(F_z-1/2)\varphi} \\ 0 \\ h_{F_z+3/2}(t) e^{i(F_z+3/2)\varphi} \end{pmatrix}, \quad (14)$$

где $h_m(t) = I_m(t) - I_m(kR_2)K_m(t)/K_m(kR_2)$, J_m — функция Бесселя первого рода порядка m , I_m и K_m — модифицированные функции Бесселя порядка m , соответственно второго и третьего рода. Функции $h_m(t)$ удовлетворяют необходимым граничным условиям [14].

Из условий непрерывности волновой функции и ее производной на границе раздела проволоки и покрывающего слоя ($r=R_1$) определяются собственные значения E_{n,F_z} . С учетом различия эффективных масс дырок в проволоке (m_1) и в покрытии (m_2), эти уравнения можно записать в компактной форме:

$$\det \begin{pmatrix} \Phi_w & \Phi_c \\ \frac{1}{m_1} \Phi'_w & \frac{1}{m_2} \Phi'_c \end{pmatrix} \bigg|_{r=R_1} = 0, \quad (15)$$

где штрих означает дифференцирование по r ,

$$\Phi_w = \begin{pmatrix} \frac{k^2 + 4k_z^2}{\sqrt{3}k^2} J_{F_z-3/2}(l) & \frac{2k_z}{k} J_{F_z-3/2}(l) & -\sqrt{3} J_{F_z-3/2}(l) & \frac{2k_z}{k} J_{F_z-3/2}(l) \\ \frac{2k_z}{k} J_{F_z-1/2}(l) & \sqrt{3} J_{F_z-1/2}(l) & \frac{2k_z}{k} J_{F_z-1/2}(l) & -\frac{k^2 + 4k_z^2}{\sqrt{3}k^2} J_{F_z-1/2}(l) \\ J_{F_z+1/2}(l) & 0 & J_{F_z+1/2}(l) & 0 \\ 0 & J_{F_z+3/2}(l) & 0 & J_{F_z+3/2}(l) \end{pmatrix}, \quad (16)$$

$$\Phi_c = \begin{pmatrix} -\frac{k^2 - 4k_z^2}{\sqrt{3}k^2} h_{F_z-3/2}(l) & \frac{2k_z}{k} h_{F_z-3/2}(l) & \sqrt{3} h_{F_z-3/2}(l) & \frac{2k_z}{k} h_{F_z-3/2}(l) \\ -\frac{2k_z}{k} h_{F_z-1/2}(l) & -\sqrt{3} h_{F_z-1/2}(l) & -\frac{2k_z}{k} h_{F_z-1/2}(l) & \frac{k^2 - 4k_z^2}{\sqrt{3}k^2} h_{F_z-1/2}(l) \\ h_{F_z+1/2}(l) & 0 & h_{F_z+1/2}(l) & 0 \\ 0 & h_{F_z+3/2}(l) & 0 & h_{F_z+3/2}(l) \end{pmatrix}. \quad (17)$$

3. Обсуждение результатов

Численные расчеты проведены для проволоки из $GaAs$, покрытой слоем из $Ga_{1-x}Al_xAs$. Использованы следующие значения параметров: $\gamma_1 = 6.85$, $\gamma_2 = 2.10$ для $GaAs$, $\gamma_1 = 6.85 - 3.40x$, $\gamma_2 = 2.10 - 1.42x$ для $Ga_{1-x}Al_xAs$, $V_0 = 1.247 \cdot 0.4 \cdot x \text{ эВ}$.

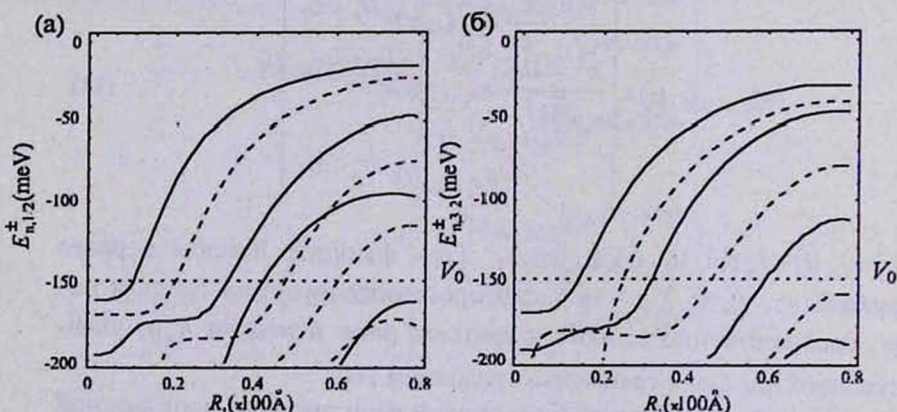


Рис. 1. Зависимость $E_{n,F_z}^{+/-}$ от радиуса R_1 для $F_z = \pm 1/2$ (а) и $F_z = \pm 3/2$ (б).

На рис. 1 представлена зависимость $E_{n,F_z}^{+/-}$ от радиуса R_1 при фиксированном значении радиуса покрытия $R_2 = 80 \text{ Å}$ для значений $x = 0.3$, $F_z = \pm 1/2$ и $F_z = \pm 3/2$ при $k_z = 0$. Сплошные линии соответствуют четным (+), а пунктирные — нечетным (−) состояниям [9]. При $R_1 = 0$ $E_{n,F_z}^{+/-}$ совпадают (с учетом V_0) с уровнями энергии в проволоке из $Ga_{1-x}Al_xAs$ с радиусом $R_2 = 80 \text{ Å}$. С увеличением радиуса проволоки дырка "падает" в яму, и $E_{1,F_z}^{+/-}$ стремится к значению первого энергетического уровня в проволоке из $GaAs$ с радиусом $R_2 = 80 \text{ Å}$. Уровни энергии проявляют тенденцию к росту, что особенно заметно для не-

четных состояний с большими n , и при стремлении R_1 к R_2 проходят через максимумы. Такое поведение уровней энергии есть результат двух конкурирующих факторов: увеличения ширины ямы из $GaAs$, приводящего к повышению уровней, и увеличения эффективной массы дырок в области барьера, приводящего к их понижению. Модельные расчеты, проведенные в предположении равенства эффективных масс дырок в проволоке и в покрывающем слое ($m_1 = m_2$), обнаруживают отсутствие немонокотных участков вне ямы и максимумов в области $R_1 \leq R_2$.

На рис.2 представлена зависимость энергетических уровней $E_{n,1/2}^{\pm}$ ($k_z = 0$) от концентрации x при значении радиуса проволоки $R_1 = 40 \text{ \AA}$ и радиуса покрывающего слоя $R_2 = 80 \text{ \AA}$. Штрих-пунктирная прямая на рис.2 представляет зависимость высоты потенциального барьера от x .

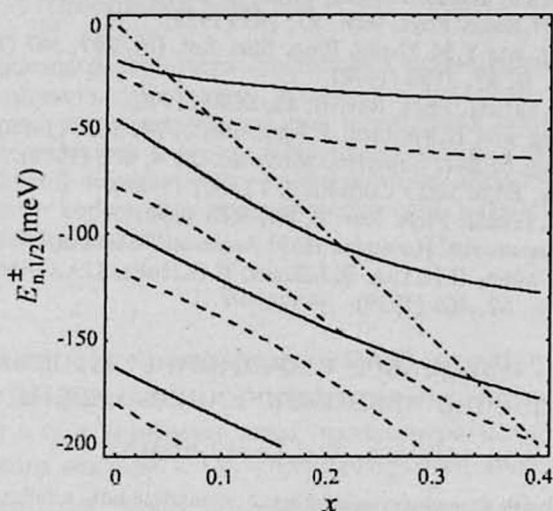


Рис.2. Зависимость энергетических уровней $E_{n,1/2}^{\pm}$ от концентрации x .

Найдена также зависимость уровней энергии $E_{n,F_z}^{\pm}$ от радиуса покрывающего слоя R_2 . При значении $R_2 = R_1$ уровни $E_{n,F_z}^{\pm}$ совпадают с уровнями энергии в бесконечно глубокой потенциальной яме из $GaAs$. С ростом R_2 $E_{n,F_z}^{\pm}$ увеличиваются, т.к. вследствие туннелирования в область барьера увеличивается размер области локализации дырки. С увеличением номера энергетического уровня значения R_2 , соответствующие выходу $E_{n,F_z}^{\pm}$ на асимптоту, смещаются в сторону больших значений.

В [15] приведены данные по измерению фотолуминесценции в проволоке с прямоугольным сечением ($L_x = 40 \text{ \AA}$, $L_y = 50 \text{ \AA}$), где первому максимуму кривой с полушириной 7.7 мэВ соответствует значение



энергии $\varepsilon_1 = 1.63383$ эВ. Расчеты для проволоки с $R_1 = \sqrt{L_x L_y} / \pi = 25.2 \text{ \AA}$ при $R_2 = 2R_1$ показывают, что прямым переходам электронов из верхнего уровня валентной зоны в зону проводимости соответствует значение энергии, превышающее ε_1 на величину 10.4 мэВ, что находится в хорошем согласии с экспериментом.

Работа выполнена при поддержке гранта INTAS-99-928.

ЛИТЕРАТУРА

1. "Self-Assembled InGaAs-GaAs Quantum Dots". Academic Press, 1999. Vol. 60, Edited by Robert K. Willardson.
2. Paul Harrison. "Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics". University of Leeds, Leeds, United Kingdom, 1999.
3. Н.Н.Леденцов, В.М.Устинов, В.А.Шукин, П.С.Копьев, Ж.И.Алферов, Д.Бимберг. ФТП, 32, 385 (1998).
4. T.Schrimpf, P.Bonsch, D.Wullner, H.-H.Weelman, A.Schlachetzki, F.Bertram, T.Riemann, and J.Christen. J. Appl. Phys., 68, 5207 (1999).
5. O.Stier, M.Grundmann, and D.Bimberg, Phys. Rev. B, 59, 5688 (1999).
6. J.M.Luttinger and W.Kohn. Phys. Rev., 97, 869 (1955).
7. G.M.He, R.Z.Wang, and Y.M.Zheng. Phys. Stat. Sol. (b), 207, 567 (1998).
8. C.Pryor. Phys. Rev. B, 57, 7190 (1998).
9. P.C.Sercel and K.J.Vahala. Phys. Rev. B, 42, 3690 (1990).
10. P.Christol, P.Lefebvre, and H.Mathieu. J. Appl. Phys., 74, 5626 (1993).
11. M.Sweeny, J.Xu, and M.Sur. Superlatt. Microstruct., 4, 623 (1988).
12. M.Sweeny and J.Xu. Solid State Commun., 72, 301 (1989).
13. P.C.Sercel and K.J.Vahala. Phys. Rev. B, 44, 5681 (1991).
14. М.М.Агасян, А.А.Киракосян. Известия НАН Армении, Физика, 34, 17 (1999).
15. M.Tsuchiya, J.M.Gaines, R.H.Yan, R.J.Simes, P.O.Holtz, L.A.Coldren, P.M.Petroff. Phys. Rev. Lett., 62, 466 (1989).

ԽՈՈՈՉԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ ԾԱԾԿՈՒՅԹՈՎ ՉԱՓԱՅՆՈՐԵՆ ԶՎԱՆՏԱՅՎԱԾ ԿԻՍԱՀԱՐՈՐԴԱՅԻՆ ԼԱՐՈՒՄ

Մ.Մ. ԱՂԱՍՅԱՆ, Ա.Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ

Պարունիչ ֆունկցիայի մեթոդի շրջանակներում աստիճանաձև, անվերջ խոր պոտենցիալ փոսի մոդելի համար ուսումնասիրված են արժեքական գոտու խոռոչային վիճակները շրջանային հատույթով քվանտային լարում: Որոշվել են ալիքային ֆունկցիաները, և ստացվել է հավասարում էներգիայի սեփական արժեքների որոշման համար: Ուսումնասիրվել է էներգիական մակարդակների վարքը $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ համակարգում կախված համաձուլվածքի x կոմպոզիցիայից, լարի և ծածկույթի շառավիղներից և խոռոչների արդյունադարձ զանգվածների հարաբերությունից:

HOLE STATES IN SIZE-QUANTIZED SEMICONDUCTOR WIRE WITH COATING

M.M. AGHASYAN, A.A. KIRAKOSYAN

Within the framework of the method of envelope function for the staircase infinitely deep potential well model (SIW), the hole states of the valence band are considered in a quantum wire with circular cross-section. The wave functions are found and an equation is obtained for energy eigenvalues. The behavior of energy levels in the $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ SIW is studied depending on the alloy concentration x , the radii of wire and coating and the effective-mass ratio of holes.