Известия НАН Армении, Физика, т.36, №1, с.20-26 (2001)

УДК 621.315

ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА В РАЗМЕРНО-КВАНТОВАННОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ПРОВОЛОКЕ С ПОКРЫТИЕМ

М.М. АГАСЯН, А.А. КИРАКОСЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 2 июня 2000 г.)

Рассмотрены оптические переходы носителей заряда из подзон валентной зоны в зону проводимости в размерно-квантованной полупроводниковой проволоке $GaAs$ круглого сечения с покрытием из $Ga_{1-x}Al_xAs$. В рамках модели ступенчатой, бесконечно глубокой ямы найдено выражение для коэффициента поглощения, зависящее от радиусов проволоки и покрывающего слоя, а также от частоты и поляризации падающего на проволоку излучения.

1. Введение

Низкоразмерные квантовые наноструктуры, в первую очередь, квантовые проволоки и квантовые точки, находятся в центре теоретических и экспериментальных исследований ввиду их уникальной значимости для фундаментальной науки, а также огромных потенциальных возможностей прикладных применений [1,2]. Значительная часть этих работ посвящена исследованию зонной структуры и оптических свойств низкоразмерных систем [3-9].

Теоретические исследования одномерной зонной структуры показывают, что пространственная ограниченность системы в двух направлениях существенным образом видоизменяет структуру валентной зоны, а именно: приводит к сильному перемешиванию состояний тяжелых (HH) и легких (LH) дырок даже в центре зоны Бриллюэна [5,9-11,12]. Спектры фотолюминесценции (PL) и фотолюминесценции возбуждения (PLE) проявляют сильную поляризационную анизотропию, что обусловлено эффектом перемешивания состояний в валентной зоне [10,11]. Перемешивание состояний тяжелых и легких дырок приводит также к перенормировке сил осцилляторов [5].

Структура валентной зоны и перемешивание состояний существенным образом зависят от формы поперечного сечения квантовой проволоки, т.е. от соотношения ее поперечных размеров [6,10].

Исследование полного оптического спектра поглощения, включающего как низкоэнергетические, так и высокоэнергетические оптические переходы в зависимости от формы поперечного сечения квантовой проволоки может дать важную информацию об одномерных подзонах в указанных структурах [5,10,11,13-15].

В настоящей работе рассмотрены оптические переходы носителей заряда из подзон валентной зоны в зону проводимости в размерно квантованной полупроводниковой проволоке $GaAs$ круглого сечения с покрытием из $Ga_{1-x}Al_xAs$. В дипольном приближении, основываясь на результатах исследований электронных и дырочных состояний в рамках модели ступенчатой, бесконечно глубокой ямы (СБЯ) [12,16], проведен расчет коэффициента поглощения и получены зависимости от радиусов проволоки и покрывающего слоя, а также от частоты и поляризации падающего на проволоку излучения.

2. Коэффициент поглощения

Волновые функции и спектр энергии электрона в зоне проводимости проволоки с радиусом R_1, покрытой слоем толщины $R_2 - R_1$, даются выражениями [16]

$$\Psi^{C}_{\nu,l,k}(r,\varphi,z)=\frac{C_1}{\sqrt{2\pi R_1^2 L}}\exp[i(kz+l\varphi)]\begin{cases}J_l(\alpha_{\nu,l}r), & r<R_1,\\ C_2 I_l(\beta_{\nu,l}r)+C_3K_l(\beta_{\nu,l}r), & R_1\le r\le R_2,\\ 0, & r>R_2,\end{cases} \quad (1)$$

$$E_{\nu,l,k_z}=\frac{\hbar^2\alpha^2_{\nu,l}}{2m_1R_1^2}+\frac{\hbar^2k_z^2}{2m_1}, \quad (2)$$

где L – длина проволоки, m_1 – эффективная масса электрона в зоне проводимости, k_z – волновое число, ν, l – квантовые числа, J_l – функция Бесселя первого рода l-го порядка, I_l и K_l – модифицированные функции Бесселя соответственно второго и третьего рода порядка l, $C_j(j=1,2,3)$ – нормировочные константы. Параметры $\alpha_{\nu,l}$, через которые выражаются собственные значения энергии поперечного квантования, определяются из условия непрерывности логарифмической производной волновой функции (1) при $r=R_1$ [16].

В рамках метода огибающей функции дырочные состояния валентной зоны в СБЯ рассмотрены в работе [12], согласно которой волновые функции дырок можно представить в следующей общей форме:

$$\Psi^{V(w,c)}_{n,F_z,k_z}(r,\varphi,z)=\begin{pmatrix}f^{(w,c)}_{n,1}(r)\exp[i(F_z-3/2)\varphi]\\ f^{(w,c)}_{n,2}(r)\exp[i(F_z-1/2)\varphi]\\ f^{(w,c)}_{n,3}(r)\exp[i(F_z+1/2)\varphi]\\ f^{(w,c)}_{n,4}(r)\exp[i(F_z+3/2)\varphi]\end{pmatrix}\exp(ik_zz), \quad (3)$$

где индексы w и c обозначают проволоку и покрытие, соответственно, $f_{n,j}^{(w,c)}(r)$ – радиальные части нормированных волновых функций, соответствующих состояниям с квантовым числом полного орбитального момента F_z и индексом энергии n.

Перейдем к расчету коэффициента поглощения. В дипольном приближении коэффициент поглощения (КП) света $\alpha(\hbar\omega)$ дается выражением

$$\alpha(\hbar\omega)=\frac{\chi^{1/2}}{c}\sum_{V,C}\frac{2\pi}{\hbar}\left|M_{V\to C}\right|^2\delta\left(E_C-E_V-\hbar\omega\right), \tag{4}$$

где предположено, что проволока и покрытие имеют одинаковые диэлектрические постоянные: $\chi_1\approx\chi_2\equiv\chi$, c – скорость света, $M_{V\to C}$ – матричный элемент межзонных оптических переходов, $\hbar\omega$ – энергия фотона. Следуя [5], вектор-потенциал линейно поляризованного света представим в виде $\mathbf{A}=\hat{z}\cos\theta+\hat{x}\sin\theta$, где $\hat{x}$ и $\hat{z}$ – единичные векторы ($\hat{z}$ направлен вдоль оси проволоки). В общей форме квадрат модуля оптического матричного элемента $M_{V\to C}$ можно представить в виде

$$\left|M_{V\to C}\right|^2=\left\{\left|\left\langle\Psi_{\nu,l,-1/2}^{C}(k_z)\right|\hat{\mathbf{p}}\left|\Psi_{n,F_z}^{V}(k_z)\right\rangle\mathbf{A}\right|^2+\left|\left\langle\Psi_{\nu,l,1/2}^{C}(k_z)\right|\hat{\mathbf{p}}\left|\Psi_{n,F_z}^{V}(k_z)\right\rangle\mathbf{A}\right|^2\right\}, \tag{5}$$

где $\hat{\mathbf{p}}$ – оператор импульса. Подставляя в (5) выражения (1) и (3) для волновых функций, находим правила отбора по k_z и F_z.

В качестве примера рассмотрим переходы из любого состояния валентной зоны с $F_z=1/2$ в состояние $\nu=1$, $l=0$ зоны проводимости. В этом случае все интегралы по θ равны нулю, кроме интеграла, содержащего вторую компоненту вектора (3). После стандартных преобразований для оптического матричного элемента получим:

$$\left|M_{V\to C}\right|^2=\left\{\left|\left\langle\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right|\hat{\mathbf{p}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\mathbf{A}\right|^2+\left|\left\langle\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right|\hat{\mathbf{p}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\mathbf{A}\right|^2\right\}\left|\left\langle\Psi_{\nu,l,k_z}^{C}e^{i\mathbf{qr}}\left|\Psi_{n,F_z,k_z}^{V}\right.\right\rangle\right|^2, \tag{6}$$

где $\mathbf{q}$ – волновой вектор фотона. Матричный элемент перехода из валентной зоны с $F_z=3/2$ в зону проводимости рассчитан по той же схеме. Используя упрощенные обозначения для представлений блоховских функций

$$\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\left|s\right\rangle\uparrow,\ \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=\left|s\right\rangle\downarrow \tag{7}$$

для зоны проводимости и

$$\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}\left|z\right\rangle\uparrow-\frac{1}{\sqrt{6}}\left(\left|x\right\rangle+i\left|y\right\rangle\right)\downarrow,\ \left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle=-\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|x\right\rangle+i\left|y\right\rangle\right)\uparrow, \tag{8}$$

$$\left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}|z\rangle\downarrow+\frac{1}{\sqrt{6}}\left(|x\rangle-i|y\rangle\right)\uparrow,\ \left|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|x\rangle-i|y\rangle\right)\downarrow \qquad (9)$$

для валентной зоны, при „разрешенных" переходах для КП окончательно получим:

$$\alpha(\hbar\omega)=\alpha_0\left\{\left(\frac{2}{3}\cos^2\theta+\frac{1}{6}\sin^2\theta\right)\sum_n\sqrt{\frac{\mu}{m_0}}\left|K^{1,0,k_z}_{n,1/2,k_z}(qR_1\sin\theta)\right|^2\frac{\Theta\left(\hbar\omega-\Delta^{1,0}_{n,1/2}\right)}{\sqrt{\hbar\omega-\Delta^{1,0}_{n,1/2}}}+\right.$$

$$\left.+\left(\frac{1}{2}\sin^2\theta\right)\sum_n\sqrt{\frac{\mu}{m_0}}\left|K^{1,0,k_z}_{n,3/2,k_z}(qR_1\sin\theta)\right|^2\frac{\Theta\left(\hbar\omega-\Delta^{1,0}_{n,3/2}\right)}{\sqrt{\hbar\omega-\Delta^{1,0}_{n,3/2}}}\right\}, \qquad (10)$$

где

$$\alpha_0=\frac{8\sqrt{2}e^2}{m_0^{3/2}cR_1^2\chi^{3/2}}\frac{\left|P_{CV}(0)\right|^2}{\hbar\omega}, \qquad (11)$$

$$\Delta^{1,0}_{n,F_z}=\varepsilon^C_{1,0}-\varepsilon^V_{n,F_z}, \qquad (12)$$

$$K^{1,0,k_z}_{n,F_z,k_z}(qR_1\sin\theta)=C_1\left\{\int_0^1 J_0(\alpha_{1,0}R_1t)J_0(qR_1t\sin\theta)f^w_{n,j}(t)t\,dt+\right.$$

$$\left.+\int_1^{R_2/R_1}\left(C_2I_0(\beta_{1,0}R_1t)+C_3K_0(\beta_{1,0}R_1t)\right)J_0(qR_1t\sin\theta)f^w_{n,j}(t)t\,dt\right\}, \qquad (13)$$

$\Theta(x)$ – функция единичного скачка, $P_{CV}(0)$ – матричный элемент импульса, $1/\mu=1/m_1+1/m_h^*$, а m_h^* – эффективная масса дырок, определяемая с помощью параболической аппроксимации законов дисперсии, найденной в [12] для каждой валентной подзоны. В выражении (13) состояниям валентной зоны с $F_z=3/2$ соответствует $j=1$, а состояниям $F_z=1/2$ $j=2$.

На рис.1 представлена зависимость КП от энергии фотона в СБЯ из $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ для фиксированного радиуса проволоки $R_1=40$ Å и для разных значений радиусов покрывающего слоя и углов поляризации. Из сравнения кривых, соответствующих различным значениям R_2, следует, что величина КП существенным образом зависит от радиуса покрывающего слоя. При $R_1=40$ Å, с уменьшением R_2 КП возрастает, несмотря на то, что толщина покрывающего слоя уменьшается. Это обусловлено тем, что с уменьшением толщины покрывающего слоя вероятность нахождения носителей заряда в области слоя возрастает, тогда как при увеличении R_2 носители в основном локализованы в проволоке. Из рис.1 видно также, что максимумы спектральных кривых поглощения существенным образом зависят от угла поляризации.

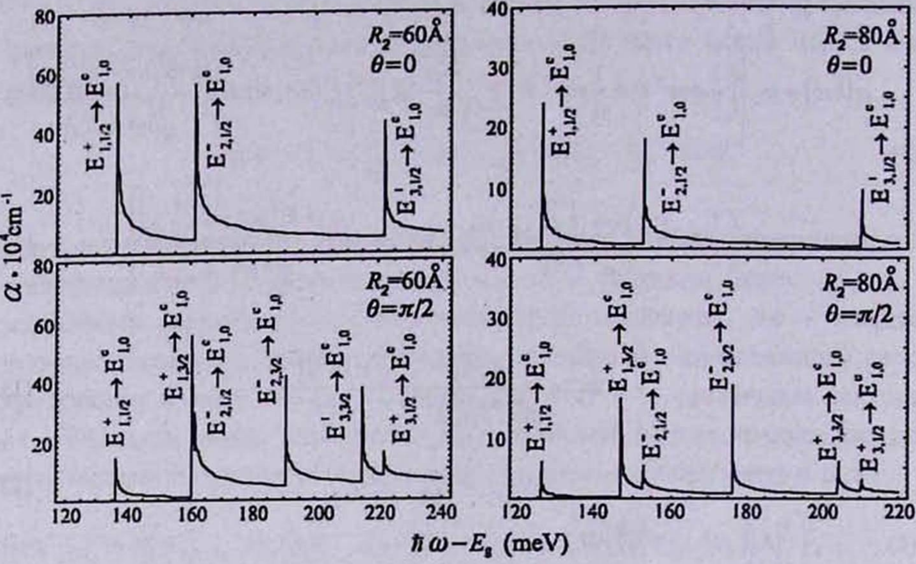

Рис.1. Зависимость коэффициента поглощения от энергии фотона при $R_1 = 40$ Å.

Из численных оценок квадрата оптического матричного элемента следует, что, в отличие от случая проволоки с конечным барьером [5], в СБЯ оптические переходы из нечетных состояний в зону проводимости не равны нулю.

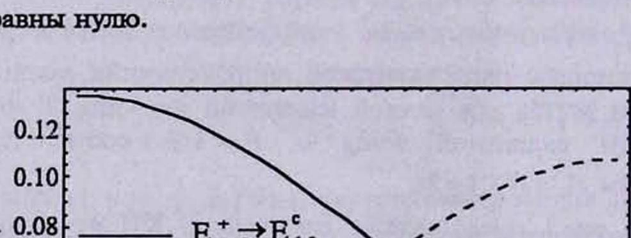

Рис.2. Зависимость квадрата оптического матричного элемента от угла поляризации.

На рис.2 представлена зависимость квадрата модуля оптического матричного элемента для переходов $(1,1/2)_V \to (1,0)_C$ и $(1,3/2)_V \to (1,0)_C$ от угла поляризации для проволоки с $R_1 = 40$ Å, $R_2 = 80$ Å. Для переходов $(1,1/2)_V \to (1,0)_C$ эта величина при $\theta = 0$ в четыре раза больше, чем при $\theta = \pi/2$. Для переходов $(1,3/2)_V \to (1,0)_C$ $|M|^2$ при $\theta = 0$ равен нулю и с увеличением θ монотонно растет.

Исследована также зависимость отношения интенсивностей пиков КП для переходов $(1,1/2)_V \to (1,0)_C$ и $(1,3/2)_V \to (1,0)_C$ от угла поляризации для различных значений радиуса проволоки. Полученные кривые симметричны относительно точки максимума $\theta = \pi/2$ и монотонно убывают до нулевого значения при $\theta = 0$ и $\theta = \pi$. Согласно численным оценкам, с увеличением радиуса проволоки и толщины покрытия, максимумы при $\theta = \pi/2$ уменьшаются. Такое поведение КП было наблюдено экспериментально [10,17].

Следует отметить, что конечная толщина покрывающего слоя приводит к появлению таких межзонных оптических переходов, которые запрещены в случае проволоки в неограниченной среде.

Хотя экситонные эффекты нами не были учтены, полученные результаты находятся в хорошем качественном соответствии с теоретическими данными, полученными для Т- и V-образных прямоугольных квантовых проволок [10,11,14,15,17]. Такое соответствие может быть результатом симметрии кулоновского взаимодействия, если предположить, что экситонные состояния формируются изотропным перемешиванием оптически анизотропных электронных и дырочных состояний [13].

ЛИТЕРАТУРА

1. Self-Assembled InGaAs-GaAs Quantum Dots. New York, Academic Press, 1999. Semiconductors and Semimetals, vol.60, edited by Robert K.Willardson.
2. P.Harrison. Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics. University of Leeds, Leeds, United Kingdom, 1999.
3. J.A.Brum, G.Bastard, L.L.Chang, L.Esaki. Superlattices Microstruct., 3, 47 (1987).
4. U.Bockelman, G.Bastard. Phys. Rev. B, 45, 1688 (1992).
5. P.C.Sercel, J.K.Vahala. Phys. Rev. B, 44, 5681 (1991).
6. H.Ando, S.Nojima, H.Kanbe. J. Appl. Phys., 74, 6383 (1993).
7. H.Ando, A.Chavez-Pirson, H.Saito, H.Kanbe. J. Appl. Phys., 77, 3372 (1995).
8. G.Goldoni, A.Fasolino. Phys. Rev. B, 52, 14118 (1995).
9. G.Goldoni, F.Rossi, E.Molinari, A.Fasolino, R.Rinaldi, R.Cingolani. Appl. Phys. Lett., 69, 2965 (1996).
10. F.Vouillos, D.Y.Oberli, M.-A. Dupertuis, A.Gustafsson, F.Reinhardt, E.Kapon. Phys. Rev. B, 57, 12378 (1998).
11. T.Sogowa, H.Ando, S.Ando, H.Kanbe. Phys. Rev. B, 56, 1958 (1997).
12. М.М.Агасян, А.А.Киракосян. Известия НАН Армении, Физика, 35, 179 (2000).
13. G.Goldoni, F.Rossi, E.Molinavi, A.Fasolino. Phys. Rev. B, 55, 7110 (1997).

14. I.Yassievich, U.Rossler. J. Phys.: Condens. Matter, 6, 7927 (1994).
15. S.T.Chou, D.E.Wohlert, K.Y.Cheng, K.C.Hsieh. J. Appl. Phys., 83, 3469 (1998).
16. М.М.Агасян, А.А.Киракосян. Известия НАН Армении, Физика, 34, 17 (1999).
17. 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).

ԼՈՒՅՍԻ ԿԼԱՆՈՒՄԸ ԾԱԾԿՈՒՅԹՈՎ ՉԱՓԱՅՆՈՐԵՆ ՔՎԱՆՏԱՑՎԱԾ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ ԼԱՐՈՒՄ

Մ.Մ. ԱՂԱՍՅԱՆ, Ա.Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ

Դիտարկված են լիցքակիրների օպտիկական անցումները արժեքական ենթագոտիներից հաղորդականության գոտի $Ga_{1-x}Al_xAs$ ծածկույթով շրջանային հատույթով չափայնորեն քվանտացված կիսահաղորդչային $GaAs$ քվանտային լարում: Աստիճանաձև, անվերջ խոր պոտենցիալ փոսի մոդելի շրջանակներում ստացվել է կլանման գործակցի արտահայտություն՝ կախված լարի և ծածկույթի շառավիղներից, ինչպես նաև լարի վրա ընկնող ճառագայթման հաճախությունից և բևեռացումից:

LIGHT ABSORPTION IN A SIZE-QUANTIZED SEMICONDUCTOR WIRE WITH COATING

M.M. AGHASYAN, A.A. KIRAKOSYAN

The optical transitions of charge carriers from the valence subbands to the conduction band in a *GaAs* quantum wire of circular cross-section with $Ga_{1-x}Al_xAs$ coating are studied. Within the framework of the staircase infinitely deep potential well model an expression is obtained for the absorption coefficient depending both on the wire and coating radii, and on the frequency and polarization of the radiation incident on the wire as well.