

УДК 621.315

ПРЯМОЕ МЕЖЗОННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА В СИЛЬНО СПЛЮСНУТОЙ ЭЛЛИПСОИДАЛЬНОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ

Д.Б. АЙРАПЕТЯН¹, К.Г. ДВОЯН², Э.М. КАЗАРЯН²

¹Государственный инженерный университет Армении, Ереван

²Российско-Армянский (Славянский) государственный университет, Ереван

(Поступила в редакцию 21 февраля 2007 г.)

В рамках адиабатического приближения исследованы энергетические уровни и прямое межзонное поглощение света в сильно сплюснутой эллипсоидальной квантовой точке. Получены аналитические выражения для энергетического спектра частицы и граничных частот поглощения при трех режимах размерного квантования. Выявлены правила отборов для квантовых переходов.

1. Введение

В последнее время возрастает интерес к полупроводниковым квантовым точкам (КТ), что обусловлено новыми физическими свойствами этих нульмерных объектов, которые в основном являются следствием размерного квантования (РК) носителей заряда (НЗ) в них [1-3]. Развитие новейших технологий роста, таких как эпитаксиальный метод Странски-Крастанова и т.д., сделали реальным выращивание КТ различных форм и размеров. Энергетический спектр НЗ в КТ полностью квантован и напоминает энергетический спектр атомов, поэтому КТ иногда называют “искусственными атомами” [4]. В последние годы появилось много теоретических и экспериментальных работ, где рассмотрены эллипсоидальные, пирамидальные, цилиндрические и линзообразные КТ [5-10]. В результате РК физические свойства НЗ в таких структурах сильно зависят от внешней формы объекта. В ряде работ было показано, что даже малое изменение внешней геометрической формы КТ сильно влияет на спектр НЗ в таких структурах [11,12]. Иными словами, геометрическая форма и размеры конкретно взятого образца являются рычагом управления энергетическим спектром и другими физическими характеристиками НЗ в КТ. В настоящее время интенсивно исследуются полупроводниковые наноструктуры, схожие со структурами типа GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs. Во время роста КТ в результате диффузии формирующийся ограничивающий потенциал в большинстве случаев с большой точностью аппроксимируется параболическим потенциалом. Однако, эффективный параболический потенциал может возникнуть в КТ также в силу особенности ее внешней формы [13]. В частности, речь идет о КТ, имеющей форму сильно сплюснутого (вытянутого) эллипсоида вращения [14].

Исследование спектра оптического поглощения различных полупроводниковых

структур является мощным инструментом определения многих характеристик этих систем: величин запрещенных зон, эффективных масс электронов и дырок, их подвижностей, диэлектрических проницаемостей и т.д. Существует большое количество работ, посвященных теоретическому и экспериментальному изучению оптического поглощения как в массивных полупроводниках, так и в РК системах. Наличие РК существенным образом влияет на характер поглощения. Действительно, формирование новых энергетических уровней РК делает возможным новые межуровневые переходы.

В настоящей работе рассмотрены электронные состояния и прямое межзонное поглощение света в сильно сплюснутой эллипсоидальной КТ (ССЭКТ) в трех режимах РК.

2. Теория

2.1. Режим сильного РК

Рассмотрим непроницаемую ССЭКТ (см. рис.1). Тогда потенциальная энергия частицы (электрон, дырка, экситон) в цилиндрических координатах запишется в виде

$$U(\rho, \varphi, Z) = \begin{cases} 0, & \frac{\rho^2}{a_1^2} + \frac{Z^2}{c_1^2} \leq 1, \\ \infty, & \frac{\rho^2}{a_1^2} + \frac{Z^2}{c_1^2} > 1, \end{cases} \quad a_1^2 \gg c_1^2, \quad (1)$$

где c_1 и a_1 – соответственно, малая и большая полуоси ССЭКТ.

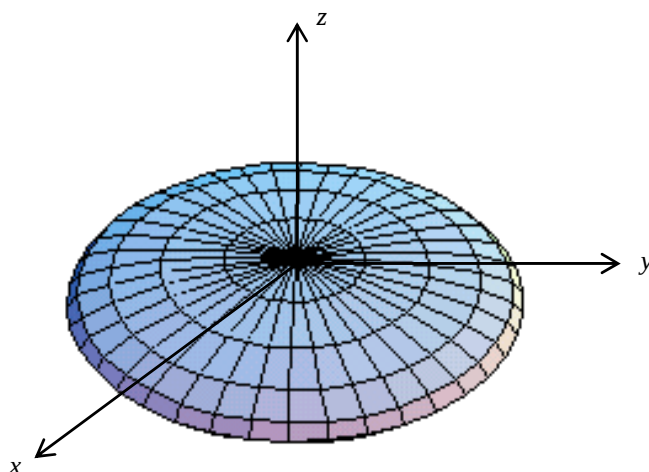


Рис.1. Сильно сплюснутая эллипсоидальная квантовая точка.

В режиме сильного РК энергия кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой значительно меньше энергии, обусловленной стенками ССЭКТ. В этом приближении кулоновским взаимодействием можно пренебречь. Тогда задача сводится к нахождению по отдельности энергетических состояний электрона и дырки. Исходя из геометрической

формы КТ, следует, что движение частицы по направлению Z происходит быстрее, чем в плоскости, перпендикулярной к ней. Это позволяет применить адиабатическое приближение [15]. Гамильтониан системы в цилиндрических координатах имеет вид

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu_p} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2\mu_p} \frac{\partial^2}{\partial Z^2} + U(\rho, \varphi, Z), \quad (2)$$

и его можно представить в виде суммы гамильтонианов “быстрой” H_1 и “медленной” H_2 подсистем в безразмерных величинах

$$H = H_1 + H_2 + U(r, \varphi, z), \quad (3)$$

где

$$H_1 = -\frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad (4)$$

$$H_2 = -\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (5)$$

Здесь $H = H/E_R$, $r = \rho/a_B$, $z = Z/a_B$, e и μ_p – соответственно, заряд и эффективная масса частицы (электрон, дырка, экситон), $E_R = \hbar^2/2\mu_p a_B^2$ – эффективная энергия Ридберга, $a_B = \kappa \hbar^2/\mu_p e^2$ – эффективный боровский радиус частицы, κ – диэлектрическая проницаемость. Волновую функцию ищем в виде

$$\psi(r, \varphi, z) = e^{im\varphi} \chi(z; r) R(r). \quad (6)$$

При фиксированном значении координаты r медленной подсистемы движение частицы локализовано в одномерной потенциальной яме с эффективной шириной

$$L(r) = 2c \sqrt{1 - \frac{r^2}{a^2}}, \quad (7)$$

где $a = a_1/a_B$ и $c = c_1/a_B$. Из решения уравнения Шредингера “быстрой” подсистемы для энергетического спектра частицы получаем

$$\varepsilon_1(r) = \frac{\pi^2 n^2}{L^2(r)}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (8)$$

Для нижних уровней спектра частица в основном локализована в промежутке $r \leq a$. Исходя из этого, разложим $\varepsilon_1(r)$ в ряд

$$\varepsilon_1(r) \approx \varepsilon_0 + \alpha_0^2 r^2, \quad (9)$$

где $\varepsilon_0 = \pi^2 n^2 / 4c^2$, $\alpha_0 = \pi n / 2ac$. Выражение (9) является эффективным потенциалом, входящим в уравнение Шредингера “медленной” подсистемы. Для полной энергии системы получается

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + 2\alpha_0(N+1), \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad (10)$$

2.2. Режим промежуточного РК

В этом режиме учитывается кулоновское взаимодействие электрона и дырки. Очевидно, что вследствие РК такое взаимодействие наглядно проявится только в радиальном направлении. Поэтому ограничимся рассмотрением случая двумерного экситона. Понятно, что в этом режиме РК энергия движения электрона превалирует над энергией движения тяжелой дырки (из условия $\mu_e \ll \mu_h$). Исходя из вышесказанного, электронный потенциал, действующий на дырку, можно усреднить по движению электрона и записать в виде

$$\tilde{V}_{n,m,N}(\rho) = -\frac{e^2}{\kappa} \int_0^{2\pi} \int_0^{a_1} \frac{|\Psi_{n,m,N}(\rho', \varphi)|^2}{\sqrt{\rho^2 + \rho'^2 - \rho\rho' \cos \varphi}} \rho' d\rho' d\varphi, \quad (11)$$

где $\Psi_{n,m,N}(\rho')$ – волновая функция электрона. Условие $a_h \ll c_1$ позволяет разложить потенциал (11) в ряд вблизи точки $\rho = 0$, где $a_h = \kappa \hbar^2 / \mu_h e^2$ – эффективный боровский радиус дырки. Окончательно для (11) в безразмерных величинах получим

$$V_{100}(r) = -\alpha + \beta^2 r^2, \quad (12)$$

где

$$V_{100}(r) = \frac{\tilde{V}_{100}(\rho)}{E_R}, \quad \alpha = \frac{16}{3} \sqrt{\frac{2\pi}{ac}}, \quad \beta^2 = \frac{2\pi^2}{ac} \sqrt{\frac{2\pi}{ac}}. \quad (13)$$

Волновая функция и энергия дырки определяются из уравнения Шредингера с усредненным потенциалом (12). После несложных преобразований для энергетического спектра дырки в безразмерных величинах получим

$$\varepsilon = \varepsilon' - \alpha + 2\sqrt{\gamma^2 + \beta^2} (N' + 1), \quad N' = 0, 1, 2, \dots, \quad (14)$$

где введены обозначения $\varepsilon' = \pi^2 n'^2 / 4c^2$, $\gamma = \pi n' / 2ac$.

2.3. Режим слабого РК

В этом случае энергия связи экситона превалирует над энергией РК. Это значит, что энергия системы в основном обусловлена кулоновским взаимодействием между электроном и дыркой. Иными словами, рассматривается движение экситона как целого в ССЭКТ. Тогда волновую функцию системы можно представить в виде

$$f(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \varphi(\mathbf{r}) \Phi_{n,l,m}(\mathbf{R}), \quad (15)$$

где $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h$, $\mathbf{R} = \mu_e \mathbf{r}_e + \mu_h \mathbf{r}_h / (\mu_e + \mu_h)$. Здесь волновая функция $\varphi(\mathbf{r})$ описывает относительное движение электрона и дырки, а $\Phi_{n,l,m}(\mathbf{R})$ – движение центра тяжести экситона. Гамильтониан системы запишется в виде

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{r}}^2 - \frac{e^2}{\kappa |\mathbf{r}|}, \quad (16)$$

где $M = \mu_e + \mu_h$, $\mu = \mu_e \mu_h / (\mu_e + \mu_h)$. Для движения центра тяжести экситона получается аналогичный (10) результат, но под массой μ_p понимаем массу экситона M . А для энергетического спектра относительного движения экситона в безразмерных величинах

имеем

$$\varepsilon_{ex} = \frac{E_{ex}}{E_R} = \frac{\mu}{M} \frac{1}{q^2}. \quad (17)$$

Окончательно для полной энергии получим

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + 2\alpha_0(N+1) - \varepsilon_{ex}, \quad (18)$$

где

$$\varepsilon_0 = \frac{\pi^2 n^2}{4c^2}, \quad \alpha_0 = \frac{\pi n}{2ac}. \quad (19)$$

3. Прямое межзонное поглощение света

Перейдем к рассмотрению прямого межзонного поглощения света в ССЭКТ в режиме сильного РК, когда кулоновским взаимодействием между электроном и дыркой можно пренебречь. Рассмотрим случай тяжелой дырки, когда $\mu_e \ll \mu_h$. Коэффициент поглощения определяется выражением

$$K = A \sum_{v,v'} \left| \int \Psi_v^e \Psi_{v'}^h d\mathbf{r} \right|^2 \delta(\hbar\Omega - E_g - E_v^e - E_{v'}^h), \quad (20)$$

где v и v' – наборы квантовых чисел (КЧ), соответствующих электрону и тяжелой дырке, E_g – ширина запрещенной зоны массивного полупроводника, Ω – частота падающего света, A – величина, пропорциональная квадрату матричного элемента, взятого по блоховским функциям [16]. В режиме сильного РК окончательно для величины K и для края поглощения (КП) получим

$$K = A \sum_{m,n,N} \delta(\hbar\Omega - E_g - E_v^e - E_{v'}^h), \quad (21)$$

$$W_{100} = 1 + \frac{\pi^2}{4} \frac{d^2}{c_1^2} + \pi \frac{d^2}{a_1 c_1}, \quad (22)$$

где $W_{100} = \hbar\Omega_{100}/E_g$, а $d = \hbar/\sqrt{2\mu E_g}$. Формула (22) характеризует зависимость эффективной ширины запрещенной зоны от полуосей a_1 и c_1 . С уменьшением обеих полуосей КП сдвигается в коротковолновую область, однако зависимость от малой полуоси проявляется сильнее. Рассмотрим теперь правила отборов для КЧ. Для магнитного КЧ разрешены переходы между уровнями с $m = -m'$, а для КЧ быстрой подсистемы – переходы $n = n'$. Для осцилляторного КЧ разрешены переходы для уровней с $N = N'$. Отметим, что аналитический вид выражения (21) приведен с учетом вышеупомянутых правил отбора КЧ.

Перейдем к рассмотрению прямого межзонного поглощения света в ССЭКТ в режиме промежуточного РК. В рассматриваемом случае учет электронно-дырочного взаимодействия приводит к тому, что в спектре межзонного оптического поглощения каждая линия, соответствующая заданным значениям v , превращается в серию близко расположенных линий, отвечающих различным значениям v' . Коэффициент поглощения в этом режиме РК имеет вид

$$K = A \sum_{v,v'} \left| \Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) \delta(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h) d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_h \right|^2 \delta(\hbar\Omega - E_g - E_v^e - E_{v'}^h). \quad (23)$$

Окончательно для коэффициента поглощения K и для КП получим, соответственно,

$$K = A \sum_{\substack{m,n \\ n_r, n_r'}} \left| I_{n_r, n_r'}^{mn} \right|^2 \delta(\hbar\Omega - E_g - E_v^e - E_{v'}^h), \quad (24)$$

$$W_{100} = 1 + \frac{\pi^2}{4} \frac{d^2}{c_1^2} + \pi \frac{\mu}{\mu_e} \frac{d^2}{a_1 c_1} - \frac{\alpha E_h}{E_g} + \frac{2E_h}{E_g} \sqrt{\gamma^2 + \beta^2}. \quad (25)$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned} I_{n_r, n_r'}^{mn} &= \frac{1}{4} (\alpha_0 \beta_0)^{\frac{|m|+1}{2}} \frac{\Gamma(|m|+1+n_r+n_r')}{\Gamma^{1/2}(|m|+1+n_r) \Gamma^{1/2}(|m|+1+n_r') \sqrt{n_r! n_r'!}} \times \\ &\times \frac{(\lambda - \alpha_0)^{n_r} (\lambda - \beta_0)^{n_r'}}{\lambda^{n_r+n_r'+|m|+1}} {}_2F_1 \left\{ -n_r, n_r'; -n_r - n_r' - |m|; \frac{\lambda(\lambda - \alpha_0 - \beta_0)}{(\lambda - \alpha_0)(\lambda - \beta_0)} \right\}, \\ \beta_0 &= \sqrt{\alpha_0^2 + \frac{\beta^2 a_B^2}{E_R}}, \quad \lambda = \frac{\alpha_0}{2} + \frac{\beta_0}{2}, \end{aligned} \quad (26)$$

где n_r – радиальное КЧ ($N = 2n_r + |m|$). В этом случае разрешены переходы между уровнями с КЧ $m = -m'$ и $n = n'$.

Перейдем к рассмотрению прямого межзонного поглощения света в режиме слабого РК. Ввиду локализации экситона в сравнительно небольшой окрестности геометрического центра КТ, для коэффициента поглощения можем записать выражение

$$K = A \sum_{n, n_r, l, m} \left| \Phi(0) \right|^2 \left| \int \Phi_{n, n_r, m}(\mathbf{R}) d\mathbf{R} \right|^2 \delta(\hbar\Omega - E_g - E). \quad (27)$$

Следует отметить, что $\Phi(0) \neq 0$ только для основного состояния, когда $l = m = 0$ (l – орбитальное КЧ). В режиме слабого РК окончательно для коэффициента поглощения и для КП получим

$$K = A \sum_{n, n_r} \frac{32 a_1 c_1^2}{\pi^5 n^3 (a_{ex}^\mu)^3} \frac{n_r!}{\Gamma^3(1+n_r)} \delta(\hbar\Omega - E_g - E), \quad (28)$$

$$W_{100} = 1 + \frac{\pi^2}{4} \frac{h^2}{c_1^2} + \pi \frac{h^2}{a_1 c_1} - \frac{h^2}{a_{ex}^\mu a_{ex}^M}, \quad (29)$$

где $W_{100} = \hbar\Omega_{100} / E_g$, $h = \hbar / \sqrt{2ME_g}$, $a_{ex}^\mu = \kappa \hbar^2 / \mu e^2$ и $a_{ex}^M = \kappa \hbar^2 / Me^2$. Наиболее важной особенностью этого случая является то, что сдвиг экситонного уровня с изменением полуосей ССЭКТ определяется полной массой экситона.

4. Обсуждение

Сперва рассмотрим случай сильного РК. Как видно из (10), энергетический спектр НЗ в ССЭКТ является эквидистантным. Полученный результат относится только к нижним уровням спектра (для малых значений КЧ). Численные расчеты для случая сильного РК сделаны для КТ из GaAs со следующими параметрами: $\mu_e = 0.067 m_e$, $\mu_h = 0.12 \mu_h$, $\kappa = 13.8$,

$E_R = 5.275$ мэВ, $a_e = 104$ Å, $a_h = 15$ Å – эффективные боровские радиусы электрона и дырки, $E_g = 1.43$ эВ – ширина запрещенной зоны массивного полупроводника. При режиме сильного РК частота перехода между эквидистантными уровнями (для значения $n = 0$), при фиксированных значениях $a = 2.5a_e$, $c = 0.5a_e$ получается $\omega_{10} = 2.17 \times 10^{13} \text{ с}^{-1}$, что соответствует инфракрасному диапазону спектра. При тех же значениях КЧ, но уже при $a = 2a_e$, $c = 0.4a_e$ получается $\omega_{10} = 3.39 \times 10^{13} \text{ с}^{-1}$, что в полтора раза больше. Как видно из (10), с увеличением полуосей энергия частицы убывает, при этом энергия более “чувствительна” к изменению малой полуоси, что является следствием большего вклада РК в энергию частицы в направлении оси вращения эллипсоида. Следует отметить, что с увеличением полуосей уровни энергии сближаются, однако их эквидистантность не нарушается. На рис.2 и 3 приведены зависимости порога поглощения, соответственно, от малой и большой полуосей ССЭКТ. С уменьшением полуосей порог поглощения увеличивается, что является следствием увеличения РК (увеличивается “эффективная” ширина запрещенной зоны). Как видно из рисунков, изменение КП проявляется ярче в зависимости от малой полуоси ССЭКТ. По той же причине кривые, соответствующие разным значениям малой полуоси (см. рис.2), обеспечивают больший сдвиг, чем в обратном случае (см. рис.3).

В режиме промежуточного квантования учет двумерного кулоновского взаимодействия электрона и дырки проявляется через коэффициенты α и β в формулах (12)–(14). Отметим, что при предельном переходе $\alpha \rightarrow 0$, $\beta \rightarrow 0$ приходим к результатам режима сильного РК.

В режиме слабого РК, когда движение частицы обусловлено кулоновским взаимодействием, а РК является поправкой к нему, численные расчеты проведены для КТ из InP, который имеет следующие параметры: $\mu_e = 0.07m_e$, $\mu_h = 0.175m_e$, $E_g = 1.28$ эВ, $\kappa = 12.61$, $E_R = 6.523$ мэВ, $a_e = 91.5$ Å, $a_h = 16$ Å. Как видно из (18), над каждым экситонным уровнем располагаются семейства эквидистантных уровней, обусловленные РК. С увеличением значений полуосей эквидистантные уровни понижаются и межуровневые расстояния уменьшаются.

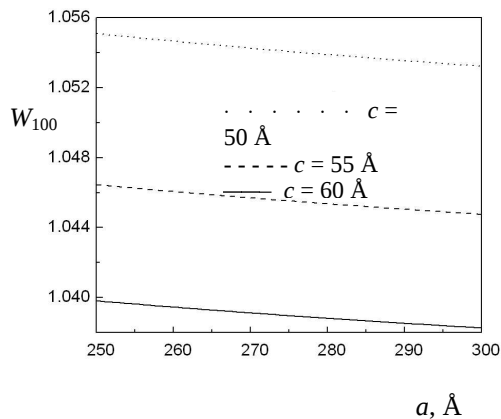


Рис.2. Зависимости порога поглощения от большой полуоси ССЭКТ при фиксированных значениях малой полуоси.

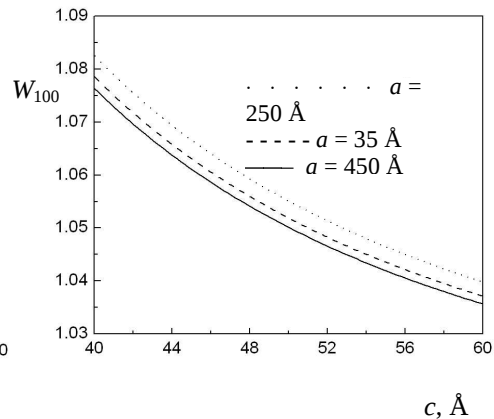
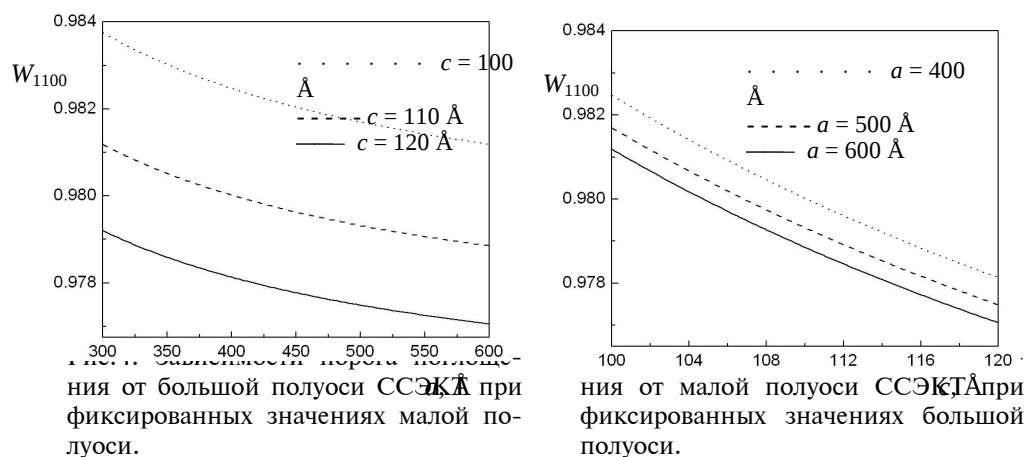
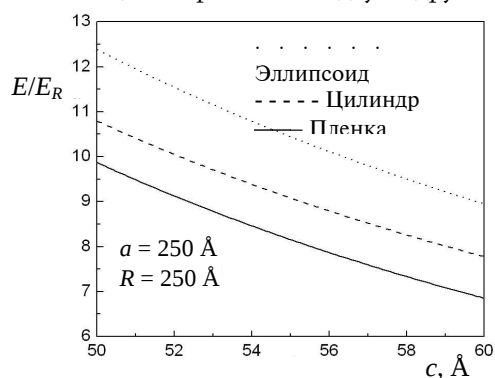


Рис.3. Зависимости порога поглощения от малой полуоси ССЭКТ при фиксированных значениях большой полуоси.

На рис.4 и 5 приведены зависимости края поглощения от полуосей ССЭКТ. Как видно из рисунков, в этом случае учет кулоновского взаимодействия приводит к уменьшению ширины “эффективной” запрещенной зоны. Иначе говоря, переходы возможны при меньших значениях падающего света и, следовательно, КП в этом случае принимает меньшие значения. Из этого следует, что учет кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой приводит к смещению КП в сторону длинных волн.



Наконец, на рис.6 приведены сравнительные зависимости энергии основного состояния электрона в ССЭКТ, в квантовой пленке и в цилиндрической КТ из GaAs (для равных значений большой полуоси и радиуса цилиндра), соответственно, от малой полуоси, высоты цилиндрической КТ и ширины квантовой пленки. Как видно, кривая энергии основного состояния электрона в ССЭКТ расположена выше, что обусловлено более сильным вкладом РК в энергию частицы по сравнению с двумя другими случаями.



Работа выполнена в рамках Национальной целевой программы “Полупроводниковая наноэлектроника”.

ЛИТЕРАТУРА

1. **P.Harrison**. Quantum wells, wires and dots. Theoretical and computational physics. John Wiley & Sons Ltd, NY, 2005.
2. **G.Bastard**. Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures. Les editions de physique, Les Ulis Cedex, Paris, 1989.
3. **Э.М.Казарян, С.Г.Петросян**. Физические основы полупроводниковой наноэлектроники. Ереван, изд. РАУ, 2005.
4. **M.Bayer, O.Stern, P.Hawrylak, S.Fafard, A.Forchel**. Nature, **405**, 923 (2000).
5. **K.G.Dvoyan**. Proc. of the Fifth International Conference on Semiconductor Micro- and Nanoelectronics, Agveran, Armenia, September 16–18 2005, p.169.
6. **C.Boze, C.K.Sarkar**. Physica B, **253**, 238 (1998).
7. **M.Califano, P.Harrison**. J. Appl. Phys., **86**, 5054 (1999).
8. **M.S.Atoyan, E.M.Kazaryan, H.A.Sarkisyan**. Physica E, **22**, 860 (2004).
9. **Д.Б.Айрапетян, К.Г.Двоян**. Изв. НАН Армении, Физика, **40**, 365 (2005).
10. **D.B.Hayrapetyan, K.G.Dvoyan**. Proc. of the Fifth International Conference on Semiconductor Micro- and Nanoelectronics, Agveran, Armenia, September 16–18 2005, p.165.
11. **K.G.Dvoyan, E.M.Kazaryan**. Phys. Stat. Sol. (b), **228**, 695 (2001).
12. **K.G.Dvoyan, E.M.Kazaryan, L.S.Petrosyan**. Physica E, **28**, 333 (2005).
13. **P.Maksym, T.Chakraborty**. Phys. Rev. Lett., **65**, 108 (1990).
14. **А.С.Гаспарян, Е.М.Казарян**. Изв. НАН Армении, Физика, **32**, 130 (1997).
15. **В.М.Галицкий, Б.М.Карнаков, В.И.Коган**. Задачи по квантовой механике. М., Наука, 1981.
16. **Ал.Л.Эфрос, А.Л.Эфрос**. ФТП, **16**, 772 (1982).

DIRECT INTERBAND LIGHT ABSORPTION IN A STRONGLY OBLATED ELLIPSOIDAL QUANTUM DOT

D.B. HAYRAPETYAN, K.G. DVOYAN, E.M. KAZARYAN

Within the framework of adiabatic approximation the energy levels and direct interband light absorption in a strongly oblated ellipsoidal quantum dot are studied. Analytical expressions for the particle energy spectrum and for absorption threshold frequencies at three regimes of quantization are obtained. Selection rules for quantum transitions are revealed.