

УДК 621.315

ПРЯМОЕ МЕЖЗОННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА В СИЛЬНО ВЫТЯНУТОЙ ЭЛЛИПСОИДАЛЬНОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ

Д.Б. АЙРАПЕТЯН

Государственный инженерный университет Армении, Ереван

(Поступила в редакцию 22 июня 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 граничные частоты поглощения при трех режимах размерного квантования. Выявлены правила отбора для квантовых переходов.

1. Введение

Развитие новейших технологий роста, таких как эпитаксиальный метод Странски–Крастанова и т.д., сделали реальным выращивание полупроводниковых квантовых точек (КТ) различных форм и размеров [1]. Как известно, энергетический спектр носителей заряда (НЗ) в КТ полностью квантован и напоминает энергетический спектр атомов (искусственные атомы) [2]. В последние годы появилось много теоретических и экспериментальных работ, где рассмотрены эллипсоидальные, пирамидальные, цилиндрические и линзообразные КТ [3-7]. 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 [8]. В частности, речь идет о КТ, имеющей форму сильно вытянутого эллипсоида вращения [9].

В настоящей работе в рамках адиабатического приближения рассмотрены электронные состояния и прямое межзонное поглощение света в сильно вытянутой эллипсоидальной КТ (СВЭКТ). Получены аналитические выражения для энергетического спектра частицы и граничные частоты поглощения при трех режимах размерного квантования (РК). Выявлены правила отбора для квантовых переходов.

2. Теория

2.1. Режим сильного РК

Рассмотрим движение частицы (электрон, дырка) в СВЭКТ. Потенци-

альная энергия частицы в цилиндрических координатах запишется в виде

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

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

В режиме сильного РК энергия кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой значительно меньше энергии, обусловленной вкладом РК. В этом приближении кулоновским взаимодействием можно пренебречь. Тогда задача сводится к нахождению по отдельности энергетических состояний электрона и дырки. Из геометрической формы КТ следует, что движение частицы по радиальному направлению происходит быстрее, чем по направлению Z . Это позволяет применить адиабатическое приближение [10]. 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

$$H_1 = -\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right], \quad (4)$$

$$H_2 = -\frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (5)$$

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

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

При фиксированном значении координаты z медленной подсистемы движение частицы локализовано в двумерной потенциальной яме с эффективной переменной шириной

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

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

$$\epsilon_1(z) = \alpha_{n+1,m}^2 / L^2(z), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (8)$$

где $\alpha_{n+1,m}$ – нули функции Бесселя первого рода. Для нижних уровней спектра частица в основном локализована в промежутке $|z| \ll a$. Исходя из

этого, разложим $\varepsilon_1(z)$ в ряд

$$\varepsilon_1(z) \approx \varepsilon_0 + \omega_0^2 z^2, \quad (9)$$

где $\varepsilon_0 = \alpha_{n+1,m}^2 / a^2$, $\omega_0 = \alpha_{n+1,m} / ac$. Выражение (9) является эффективным потенциалом, входящим в уравнение Шредингера медленной подсистемы. Для полной энергии системы получается

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + 2\omega_0(N+1/2), \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad (10)$$

2.2. Режим промежуточного РК

В этом режиме учитывается кулоновское взаимодействие электрона и дырки. Очевидно, что вследствие РК такое взаимодействие наглядно проявится только по направлению Z . Поэтому ограничимся рассмотрением случая одномерного 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

$$\tilde{V}_{n,m,N}(Z) = -\frac{e^2}{\kappa} \int_{-a_1}^{a_1} \frac{|\Psi_{n,m,N}(Z')|^2}{|Z - Z'|} dZ', \quad (11)$$

где $\Psi_{n,m,N}(Z')$ – волновая функция электрона. Условие $a_h \ll a_1$ позволяет разложить потенциал (11) в ряд вблизи точки $Z = 0$, 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 введены обозначения

$$V_{100}(r) = \frac{\tilde{V}_{100}(\rho)}{E_R}, \quad \alpha = \frac{3}{4} \frac{1}{c} \left(1 + \ln \frac{\alpha_{10} c}{a} \right) \sqrt{\frac{\alpha_{10} c}{a}}, \quad \beta^2 = \frac{3}{4} \frac{\alpha_{10}}{a} \left(\ln \frac{\alpha_{10} c}{a} - 1 \right) \sqrt{\frac{\alpha_{10} c}{a}}. \quad (13)$$

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

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

где введены обозначения $\varepsilon' = \alpha_{n'+1,m'}^2 / a^2$, $\omega' = \alpha_{n'+1,m'} / ac$.

2.3. Режим слабого РК

В этом случае энергия системы в основном обусловлена кулоновским взаимодействием между электроном и дыркой. Иными словами, рассматривается движение экситона как целого в СВЭКТ. 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 $\varphi(\mathbf{r})$ описывает относительное движение электрона и дырки, а $\Phi_{n,l,m}(\mathbf{R})$ – движение центра тяжести экситона. Гамильтониан системы запишется в виде

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

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

$$\varepsilon_{ex} = \frac{E_{ex}}{E_R} = \frac{\mu}{M} \frac{1}{k^2}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (17)$$

Окончательно для полной энергии получим

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + 2\omega_0 (N + 1/2) - \varepsilon_{ex}, \quad N = 0, 1, 2, \dots, \quad (18)$$

где $\varepsilon_0 = \alpha_{n+1,m}^2 / a^2$, $\omega_0 = \alpha_{n+1,m} / ac$.

3. Прямое межзонное поглощение света

Перейдем к рассмотрению прямого межзонного поглощения света в СВЭКТ в режиме сильного РК. Рассмотрим случай тяжелой дырки, когда $\mu_e \ll \mu_h$. Коэффициент поглощения определяется выражением

$$K = A \sum_{\mathbf{v}, \mathbf{v}'} \left| \int \Psi_{\mathbf{v}}^e \Psi_{\mathbf{v}'}^h d\mathbf{r} \right|^2 \delta(\hbar\Omega - E_g - E_{\mathbf{v}}^e - E_{\mathbf{v}'}^h), \quad (19)$$

где $\mathbf{v}$ и $\mathbf{v}'$ – наборы квантовых чисел, соответствующих электрону и тяжелой дырке, E_g – ширина запрещенной зоны массивного полупроводника, Ω – частота падающего света, A – величина, пропорциональная квадрату модуля матричного элемента дипольного момента, взятого по блоховским функциям [11]. В режиме сильного РК окончательно для величины K и для края поглощения получим

$$K = A \sum_{n,m,N} \left(\frac{J_{1+m}(\alpha_{n+1,m})}{J_{1-m}(\alpha_{n+1,m})} \right)^2 \delta(\hbar\Omega - E_g - E_e - E_h), \quad (20)$$

$$W_{000} = 1 + \alpha_{10}^2 \frac{d^2}{a_1^2} + \alpha_{10} \frac{d^2}{a_1 c_1}. \quad (21)$$

Здесь $W_{000} = \hbar\Omega_{000} / E_g$, а $d = \hbar / \sqrt{2\mu E_g}$. Формула (21) характеризует зависимость эффективной ширины запрещенной зоны от полуосей a_1 и c_1 . С увеличением обеих полуосей край поглощения уменьшается, однако зависи-

мость от малой полуоси проявляется сильнее. Рассмотрим теперь правила отбора для переходов между уровнями с разными квантовыми числами. Для магнитного квантового числа разрешены переходы между уровнями с $m = -m'$, а для квантового числа быстрой подсистемы – переходы с $n = n'$. Для осцилляторного квантового числа разрешены переходы для уровней с $N = N'$. Отметим, что аналитический вид выражения (20) приведен с учетом вышеупомянутых правил отборов.

Перейдем к рассмотрению прямого межзонного поглощения света в СВЭКТ 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 ν , превращается в серию близко расположенных линий, отвечающих различным значениям ν' . Коэффициент поглощения в этом режиме РК имеет вид

$$K = A \sum_{\nu, \nu'} \left| \int \Psi(r_e, r_h) \delta(r_e - r_h) dr_e dr_h \right|^2 \delta(\hbar\Omega - E_g - E_\nu^e - E_{\nu'}^h). \quad (22)$$

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

$$K = A \sum_{\substack{m, n \\ N, N'}} \left| I_{N, N'}^{m, n} \right|^2 \delta(\hbar\Omega - E_g - E_\nu^e - E_{\nu'}^h), \quad (23)$$

$$W_{000} = 1 + \alpha_{10}^2 \frac{d^2}{a_1^2} + \alpha_{10} \frac{\mu}{\mu_e} \frac{d^2}{a_1 c_1} + \frac{\alpha E_h}{E_g} + \frac{E_h}{E_g} \sqrt{\omega'^2 + \beta^2}. \quad (24)$$

Здесь через $I_{N, N'}^{m, n}$ обозначен интеграл, который вычисляется численным методом, а $W_{000} = \hbar\Omega_{000}/E_g$ и $d = \hbar/\sqrt{2\mu E_g}$. Разрешены переходы между уровнями с $m = -m'$ и $n = n'$.

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

$$K = A \sum_{n, n', l, m} |\varphi(0)|^2 \left| \int \Phi_{n, n', m}(R) dR \right|^2 \delta(\hbar\Omega - E_g - E), \quad (25)$$

где E – энергия (18) в размерных величинах. Следует отметить, что $\varphi(0) \neq 0$ только для основного состояния, когда $l = m = 0$ (l – орбитальное квантовое число). В режиме слабого РК окончательно для коэффициента поглощения и для края поглощения получим

$$K = A \sum_{n_R, N_R} \left| J_{N_R}^{n_R} \right|^2 \delta(\hbar\Omega - E_g - E), \quad (26)$$

$$W_{1000} = 1 + \alpha_{10}^2 \frac{h^2}{a_1^2} + \alpha_{10} \frac{h^2}{a_1 c_1} - \frac{h^2}{a_{ex}^\mu a_{ex}^M}. \quad (27)$$

Здесь через $J_{N_R}^{n_R}$ обозначен интеграл, который вычисляется численным методом, а $W_{1000} = \hbar \Omega_{1000} / E_g$, $h = \hbar / \sqrt{2ME_g}$, $a_{ex}^\mu = \kappa \hbar^2 / \mu e^2$ и $a_{ex}^M = \kappa \hbar^2 / Me^2$. Наиболее важной особенностью этого случая является то, что сдвиг экситонного уровня с изменением полуосей СВЭКТ определяется полной массой экситона.

4. Обсуждение

Как видно из (10), энергетический спектр НЗ в СВЭКТ является эквидистантным. Полученный результат относится только к нижним уровням спектра. Численные расчеты для случая сильного РК сделаны для КТ из GaAs со следующими значениями параметров: $\mu_e = 0.067m_e$, $\mu_h = 0.12\mu_h$, $\kappa = 13.8$, $E_R = 5.275$ мэВ, $a_e = 104$ Å и $a_h = 15$ 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 $a_1 = 0.5a_e$, $c_1 = 2.5a_e$ получается $\omega_{00} = 3.32 \times 10^{13} \text{ с}^{-1}$, что соответствует инфракрасному диапазону спектра. При тех же значениях квантовых чисел, но уже при $a_1 = 0.4a_e$, $c_1 = 2a_e$ получается $\omega_{10} = 5.19 \times 10^{13} \text{ с}^{-1}$, 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.1 и 2 приведены зависимости порога поглощения, соответственно, от малой и большой полуосей СВЭКТ. С уменьшением полуосей порог поглощения увеличивается, что является следствием увеличения вклада РК (увеличивается “эффективная” ширина запрещенной зоны). Как видно из рисунков, изменение края поглощения проявляется сильнее в зависимости от малой полуоси СВЭКТ.

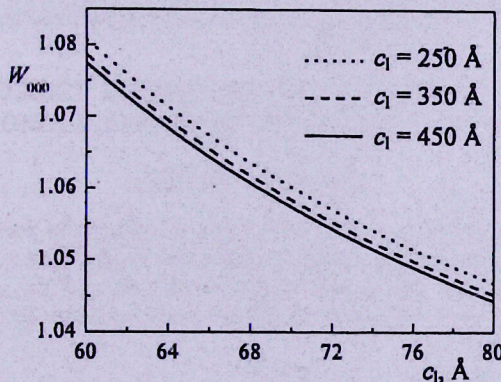


Рис.1. Зависимости порога поглощения от малой полуоси СВЭКТ при фиксированном значении большой полуоси c_1 .

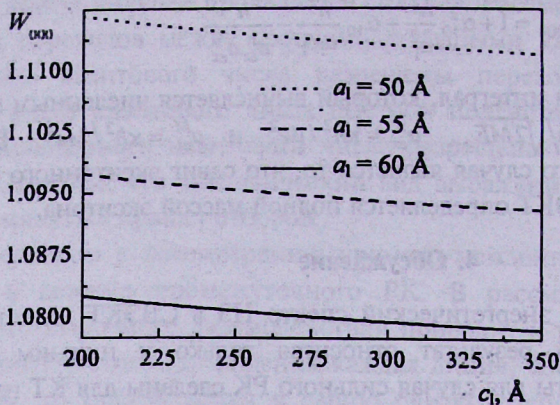


Рис.2. Зависимости порога поглощения от большой полуоси СВЭКТ при фиксированном значении малой полуоси a_1 .

В режиме промежуточного квантования учет 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 вклад РК является поправкой к нему, как видно из (18), над каждым экситонным уровнем располагаются семейства эквидистантных уровней, обусловленные РК. С увеличением значений полуосей эквидистантные уровни понижаются и межузровые расстояния уменьшаются.

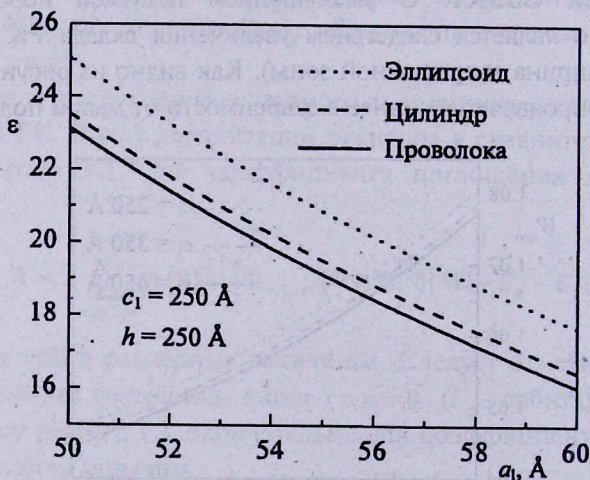


Рис.3. Зависимости основного состояния СВЭКТ, квантовой проволоки и цилиндрической КТ, соответственно, от малой полуоси, радиуса квантовой проволоки и радиуса цилиндрической КТ.

Наконец, на рис.3 приведены зависимости основных состояний электрона в СВЭКТ, в квантовой проволоке и в цилиндрической КТ из GaAs (для равных значений большой полуоси и высоты цилиндра), соответственно, от малой полуоси, радиуса квантовой проволоки и радиуса цилиндрической КТ. Как видно из рисунка, кривая энергии основного состояния электрона в СВЭКТ расположена выше, что обусловлено более сильным вкладом РК в энергию частицы по сравнению с двумя другими случаями.

В заключение автор выражает благодарность академику Э.М. Казаряну и к.ф.-м.н. К.Г. Дворяну за постановку задачи и полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. P.Harrison. Quantum wells, wires and dots. Theoretical and computational physics. John Wiley & Sons ltd, NY, 2005.
2. M.Bayer, O.Stern, P.Hawrylak, S.Fafard, A.Forchel. Nature, 405, 923 (2000).
3. Д.Б.Айрапетян, К.Г.Дворян. Изв. НАН Армении, Физика, 40, 365 (2005).
4. Д.Б.Айрапетян, К.Г.Дворян, Э.М.Казарян. Изв. НАН Армении, Физика, 42, 227 (2007).
5. M.S.Atoyan, E.M.Kazaryan, H.A.Sarkisyan. Physica E, 22, 860 (2004).
6. M.Califano, P.Harrison. J. Appl. Phys., 86, 5054 (1999).
7. C.Boze, C.K.Sarkar. Physica B, 253, 238 (1998).
8. P.Maksym, T.Chakraborty. Phys. Rev. Lett., 65, 108 (1990).
9. А.С.Гаспарян, Э.М. Казарян. Изв. НАН Армении, Физика, 32, 130 (1997).
10. В.М.Галицкий, Б.М.Карнаков, В.И.Коган. Задачи по квантовой механике. М., Наука, 1981.
11. Ал. Л.Эфрос, А.Л.Эфрос. ФТП, 16, 772 (1982).

ԼՈՒՅՍԻ ՈՒՂԻՂ ՄԻՋԳՈՏԻԱԿԱՆ ԿԼԱՆՈՒՄԸ ԽԻՍՏ ԶԳՎԱԾ ԷԼԻՊՍԱՐԴԱՅԻՆ ԲՎԱՆՏԱՅԻՆ ԿԵՏՈՒՄ

Դ.Բ. ՀԱՅՐԱՊԵՏՅԱՆ

Ադիաբատական մոտավորության շրջանակներում ուսումնասիրված են էներգիական մակարդակները և լույսի ուղիղ միջգոտիական կլանումը խիստ ձգված էլիպսարդային բվանտային կետում: Ստացված են վերլուծական արտահայտություններ մասնիկի էներգիական սպեկտրի և կլանման սահմանային հաճախությունների համար չափային բվանտացման երեք ռեժիմներում: Դուրս են բերված ջղկման կանոնները բվանտային անցումների համար:

DIRECT INTERBAND LIGHT ABSORPTION IN A STRONGLY PROLATED ELLIPSOIDAL QUANTUM DOT

D.B. HAYRAPETYAN

Within the framework of adiabatic approximation the energy levels and direct interband light absorption in a strongly prolated 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.