УДК 537.311

ВЛИЯНИЕ ВЗАИМНОЙ ДИФФУЗИИ АТОМОВ In И Al НА ЭКСИТОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ In_xGa_{1-x}As/Al_yGa_{1-y}As

В.Н. МУГНЕЦЯН, А.А. КИРАКОСЯН

Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 11 февраля 2008 г.)

Исследовано влияние взаимной диффузии атомов алюминия и индия в квантовой точке $In_xGa_{1-x}As/Al_yGa_{1-y}As$ на эмиссионную энергию и энергию связи экситона. Показано, что с увеличением диффузионной длины эмиссионная энергия монотонно увеличивается, в то время как энергия связи имеет максимум.

1. Введение

Взаимная диффузия составляющих компонент в низкоразмерных гетероструктурах, особенно в самоорганизованных квантовых точках (КТ), играет существенную роль ввиду большого значения отношения площади их поверхности к объему по сравнению с квантовыми ямами (КЯ) и проволоками (КП). Диффузия, индуцированная на послеростовом этапе, имеет важное значение, так как она способствует термической стабильности и увеличению времени функционирования приборов, созданных на основе квантовых гетероструктур. В настоящее время имеются многообещающие результаты, касающиеся применения термически индуцированной взаимной диффузии на послеростовом этапе с целью создания устройств с контролируемыми параметрами [1-7].

Большой интерес как с точки зрения прикладной, так и фундаментальной физики представляет исследование влияния диффузии на оптические свойства гетероструктур. В работах [2,3,6,8] наблюдалось значительное голубое смещение пика и сужение ширины спектра фотолюминесценции, особенно ярко выраженные для КТ.

В работах [9,10] исследовано влияние взаимной диффузии примесей на зонную структуру и коэффициент поглощения света методом замены диффузионного потенциала модельным потенциалом Вуда–Саксона, для которого известны аналитическое решение уравнения Шредингера и спектр энергии. Это позволяет найти связь между диффузионной длиной и измеряемым на опыте голубым смещением фотолюминесценции [11-13].

Влияние экситонных эффектов на оптические свойства гетероструктур во многих случаях играет значительную роль и не может быть игнорировано [14,15]. В частности, в работе [14] показано, что диффузия примеси в КЯ Cd_{1-x}Mn_xTe/CdTe приводит к увеличению эмиссионной энергии и к уменьшению энергии связи экситона.

В данной работе исследовано влияние диффузии атомов алюминия и индия в квантовой точке $\ln_x Ga_{1-x} As/Al_y Ga_{1-y} As$ на эмиссионную энергию и энергию связи экситона на основе модельного потенциала Вуда–Саксона. Показано, что с увеличением диффузионной длины эмиссионная энергия монотонно увеличивается, в то время как энергия связи имеет максимум.

2. Теория

Гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{e^2}{\chi \,|\, \vec{r_e} - \vec{r_h}\,|}\,,\tag{1}$$

где

$$\hat{H}_{0} = -\frac{\hbar^{2}}{2m_{e}} \nabla_{e}^{2} - \frac{\hbar^{2}}{2m_{h}} \nabla_{h}^{2} + V_{e} + V_{h}$$
⁽²⁾

– гамильтониан в отсутствие взаимодействия между электроном и дыркой, V_e и V_h – диффузионные потенциалы в зоне проводимости и валентной зоне, соответственно [9], χ – диэлектрическая проницаемость системы, которую ввиду слабой зависимости от концентраций индия и алюминия [16,17] можно считать постоянной.

Заменой диффузионного потенциала потенциалом Вуда–Саксона можно получить аналитические выражения волновых функций, соответствующих гамильтониану \hat{H}_0 [18]:

$$\Psi_{e,h}(r_{e,h},l) = \frac{N_0}{2\pi} \frac{f_{e,h}(r_{e,h},l)}{r_{e,h}},$$
(3)

где

$$f_{e,h}(r_{e,h},l) = \eta(r_{e,h},l)^{\nu(l)} [1 - \eta(r_{e,h},l)]^{\mu(l)} {}_{2}F_{1}[\mu(l) + \nu(l),\mu(l) + \nu(l) + 1, 2\nu(l) + 1; \eta(r_{e,h},l)],$$
(4)

$$\eta(r_{e,h}, l) = \left\{ 1 + \exp\left[\left(r_{e,h} - q(l)r_0 \right) / \alpha(l)r_0 \right] \right\}^{-1},$$
(5)

$$v_{e,h}(l) = \alpha(l)\gamma_{e,h}\varepsilon_{e,h}(l)^{1/2}, \quad \mu_{e,h}(l) = i\alpha(l)\gamma_{e,h}\sqrt{u(l) - \varepsilon_{e,h}(l)}, \quad \gamma_{e,h} = (2m_{e,h}V_{e,h}^0 r_0^2 / \hbar^2)^{1/2}, \quad (6)$$

 $V_{e,h}^0$ – начальная глубина потенциальной ямы для электронов (*e*) и дырок (*h*), r_0 – начальный радиус ямы, u(l), q(l) и $\alpha(l)$ – параметры, входящие в потенциал Вуда–Саксона [9,18]:

$$W_{e,h}(r_{e,h}) = -V_{e,h}^{0}u(l) \left\{ 1 + \exp\left[(r_{e,h} - q(l)r_0) / \alpha(l)r_0 \right] \right\}^{-1}$$
(7)

и являющиеся функциями безразмерной диффузионной длины $l = L_1 / r_0$ при фиксированном значении отношения диффузионных длин алюминия (L_2) и индия (L_1) , $\varepsilon_{e,h}(l) = |E_{e,h}|/u(l)V_{e,h}^0$, $E_{e,h}$ – энергия основного состояния электрона (дырки), N_0 – постоянная нормировки, $_2F_1(a,b,c;\eta)$ – гипергеометрическая функция [19].

Следуя вариационному принципу, выберем пробную волновую функцию в виде

$$\Psi(\mathbf{r}_{e},\mathbf{r}_{h};\delta) = N(\delta)\psi_{e}(r_{e},l)\psi_{h}(r_{h},l)\exp(-\delta|\mathbf{r}_{e}-\mathbf{r}_{h}|), \qquad (8)$$

где δ – вариационный параметр, $N(\delta)$ – постоянная нормировки.

Энергию экситонного состояния, входящую в определения эмиссионной энергии $E_{em} = E_g + E_{ex}$ (E_g – ширина запрещенной зоны $Al_yGa_{1-y}As$) и энергии связи $E_b = E_e + E_h - E_{ex}$ [14,20], найдем из условия минимума среднего значения энергии по δ :

$$E_{ex} = \min_{\delta} \left\{ \int \Psi(\mathbf{r}_{e}, \mathbf{r}_{h}; \delta) \hat{H} \Psi(\mathbf{r}_{e}, \mathbf{r}_{h}; \delta) d\mathbf{r}_{e} d\mathbf{r}_{h} \right\}.$$
(9)

Минимальное значение энергии экситонного состояния (9) можно представить в виде

$$E_{ex} = E_e + E_h - K - P_e - P_h , (10)$$

где

$$K(l,\delta_0) = \frac{N(\delta_0)^2 e^2}{\chi} \int \frac{\exp[-2\delta_0 |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|]}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} |\psi_e(r_e, l)|^2 |\psi_h(r_h, l)|^2 d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_h , \qquad (11)$$

$$P_{e,h}(l,\delta_{0}) = \frac{\hbar^{2}\delta_{0}^{2}}{2m_{e,h}} + \frac{N^{2}\hbar^{2}\delta_{0}}{m_{e,h}} \times$$

$$\times \int \frac{\exp[-2\delta_{0} | \mathbf{r}_{e} - \mathbf{r}_{h} |]}{| \mathbf{r}_{e} - \mathbf{r}_{h} |} | \psi_{h,e}(r_{h,e},l) |^{2} \psi_{e,h}^{*}(r_{e,h},l) \Big[(\mathbf{r}_{h,e} - \mathbf{r}_{e,h}) \nabla_{e,h} - 1 \Big] \psi_{e,h}(r_{e,h},l) d\mathbf{r}_{e} d\mathbf{r}_{h},$$
(12)

а δ_0 – значение параметра, соответствующее минимальному значению E_{ex} .

3. Обсуждение

На рис.1 представлены кривые зависимости эмиссионной энергии при экситонных переходах между электроном и тяжелой дыркой в КТ $In_xGa_{1-x}As/Al_yGa_{1-y}As$ радиусом 10.4 нм (эффективный боровский радиус электрона в GaAs) от диффузионной длины при одновременной диффузии атомов индия и алюминия для различных значений параметра L_2/L_1 и концентраций x и y.

Из рисунка видно, что кривые, соответствующие различным начальным концентрациям индия и алюминия, пересекаются. Такое поведение эмиссионной энергии обусловлено тем, что при одновременном увеличении начальных концентраций x и y вместе с понижением (повышением) дна зоны проводимости (валентной зоны) в области $r < r_0$ происходит его повышение (понижение) в области $r > r_0$. Из рис.1 следует также, что влиянием параметра L_2/L_1 на эмиссионную энергию, существенным при значениях l 1÷2, можно пренебречь при относительно больших значениях диффузионной длины ($l \ge 5$), т.к. в этом случае значение эмиссионной энергии в КТ с увеличением диффузионной длины приближается к соответствующему значению для массивного образца $Al_yGa_{1-y}As$ при любом значении отношения L_2/L_1 .



Рис.1. Зависимость эмиссионной энергии от диффузионной длины.



Рис.2. Зависимость энергии связи от диффузионной длины.

Увеличение эмиссионной энергии с увеличением диффузионной длины было получено в работе [14] для КЯ Cd_{1-x}Mn_xTe/CdTe: величина ее изменяется в пределах 1.6÷1.7 эВ. Сравнение полученных в нашей работе и в работе [14] результатов указывает на одинаковое поведение зависимостей эмиссионных энергий от диффузионной длины.

На рис.2 представлены кривые зависимости энергии связи экситона от диффузионной длины. Из рисунка можно заметить, что при фиксированном значении диффузионной длины увеличение начальных концентраций компонент приводит к росту энергии связи, что обусловлено усилением локализации электрона и дырки. Наличие максимума у кривых обусловлено тем, что в начальной стадии процесса диффузии степень локализации тяжелой

дырки значительно больше степени локализации электрона. Диффузия приводит к ослаблению этого различия и к увеличению степени перекрытия волновых функций частиц, вследствие чего энергия связи увеличивается. Дальнейшее увеличение диффузионной длины l приводит к размазыванию волновых функций электрона и тяжелой дырки и к уменьшению интеграла перекрытия, и следовательно, к уменьшению энергии связи экситона. Заметим, что как начальное увеличение, так и дальнейшее уменьшение энергии связи больше при больших значениях отношения L_2/L_1 ввиду большей интенсивности диффузионного процесса, с чем и связано пересечение кривых, соответствующих различным значениям параметра L_2/L_1 при определенном значении l.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. R.Leon, S.Fafard, P.G.Piva, S.Ruvimov, Z.Liliental-Weber. Phys. Rev. B, 58, R4262 (1998).
- 2. C.Lobo, R.Leon, S.Fafard, P.G.Piva. Appl. Phys. Lett., 72, 2850 (1998).
- 3. Yalin Ji, Wei Lu, Guibin Chen, Xiaoshuang Chen, Qing Wang. J. Appl. Phys., 93, 1208 (2003).
- X.C.Wang, S.J.Xu, S.J.Chua, Z.H.Zhang, W.J.Fan, C.H.Wang, J.Jiang, X.G.Xie. J. Appl. Phys., 86, 2687 (1999).
- 5. S.Fafard, C.Ni.Allen. Appl. Phys. Lett., 75, 2374 (1999).
- 6. S.J.Xu, X.C.Wang. Appl. Phys. Lett., 72, 3335 (1998).
- 7. K.Takeuchi, P.A.Moldauer. Phys. Lett. B, 28, 384 (1969).
- 8. S.Malik, C.Roberts, R.Murray, M. Pate. Appl. Phys. Lett., 71, 1987 (1997).
- 9. В.Н.Мугнецян, А.А.Киракосян. Изв. НАН Армении, Физика, 42, 83 (2007).
- В.Н.Мугнецян, А.А.Киракосян. Сборник трудов конференции "Лазерная Физика-2006", Аштарак, 2007, с.173.
- 11. T.E.Schlesinger, T. Kuech. Appl. Phys. Lett., 49, 519 (1986).
- 12. W.P.Gillin, D.J.Dunstan, K.P.Homewood, L.K.Howard, B.J.Sealy. J. Appl. Phys., 73, 3782 (1993).
- 13. R.Leon, D.R.M.Williams, J.Krueger, E.R.Weber, M.R.Melloch. Phys. Rev. B, 56, R4336 (1997).
- 14. P.Harrison, W.E.Hagston, T.Stirner. Phys. Rev. B, 47, 16404 (1993).
- 15. W.P.Gillin, K.P.Homewood, L.K.Howard, M.T.Emeny. Superlatt. Microstruct, 9, 39 (1991).
- 16. S.Adachi. J. Appl. Phys., 53, R1 (1985).
- 17. S.Adachi. J. Appl. Phys., 66, 6030 (1989).
- 18. З.Флюгге. Задачи по квантовой механике, т.1. М., Мир, 1974.
- 19. **M.Abramowitz, I.A.Stegun**. Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables. Washington D. C., 1964.
- 20. Z.Xiao. J. Appl. Phys., 86, 4510 (1999).

Վ.Ն. ՄՈՒՂՆԵՑՅԱՆ, Ա.Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ

Ուսւմնասիրված է ինդիումի և ալյումինիումի ատոմների փոխադարձ դիֆուզիայի ազդեցությունն էքսիտոնի առաքման էներգիայի և կապի էներգիայի վրա In_xGa_{1-x}As/Al_yGa_{1-y}As քվանտային կետում։ Յույց է տրված, որ դիֆուզիայի երկարության մեծացմանը զուգընթաց առաքման էներգիան մոնոտոն աՃում է, մինչդեռ կապի էներգիան ունի մաքսիմում։

EFFECT OF INTERDIFFUSION OF In AND AI ATOMS ON EXCITONIC STATES IN ${\rm In_xGa_{1-x}As/Al_yGa_{1-y}As}$ quantum dots

V.N. MUGHNETSYAN, A.A. KIRAKOSYAN

The effect of interdiffusion of aluminum and indium atoms on the exciton emission energy and binding energy in $In_xGa_{1-x}As/Al_yGa_{1-y}As$ quantum dots is studied. It is shown that with increasing diffusion length the emission energy increases monotonically, while the binding energy has a maximum.