

УДК 530.145

О МЕХАНИЗМЕ РОСТА СИЛЫ ОПТИЧЕСКИХ ПЕРЕХОДОВ В КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ Ge, ВНЕДРЕННЫХ В МАТРИЦУ Si

А.Р. МКРТЧЯН¹, Ал.Г. АЛЕКСАНИЯН², К.С. АРАМЯН^{2*}, А.А. АЛЕКСАНИЯН²

¹Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван, Армения

²Арцахский государственный университет, Степанакерт, НКР

*e-mail: k_aramyan@rambler.ru

(Поступила в редакцию 11 ноября 2015 г.)

Теоретически исследована гетероструктура Si/Ge, активная область которой состоит из квантовых точек (КТ) Ge. Высокая плотность массива КТ Ge не может служить доминантой в выборе адекватной модели, способной объяснить наблюдаемое в экспериментах увеличение интенсивности люминесценции. В основу такой модели заложены условия, способствующие повышению силы осциллятора экситона за счет «втягивания» электронных состояний в ядро КТ Ge.

1. Введение

Известно, что создание эффективных светоизлучающих приборов на основе наноструктур Si/Ge может решить основные проблемы прямой интеграции кремниевой технологии с оптоэлектронными системами [1]. В связи с этим возрос интерес к исследованиям оптических свойств квантовых точек Ge в матрице Si. В работе [2] было установлено, что основным препятствием на пути решения указанной задачи является большой латеральный размер получаемых КТ. Система Si/Ge является гетеропереходом второго типа [2], а большие размеры КТ приводят к еще более сильному пространственному разделению волновых функций электрона и дырки и тем самым уменьшают силу осциллятора оптических переходов.

Укажем, что сравнительно большой размер КТ Ge (>10 нм) приводит к низкому уровню поверхностной плотности 10^9-10^{10} см⁻² КТ, и такая низкая плотность является проблемой для достижения лазерной генерации даже для прямозонных КТ [3]. Для устранения данной проблемы в [4] был предложен и реализован механизм получения КТ сверхмалых размеров (<5 нм) с достаточно высокой поверхностной плотностью $\sim 5 \times 10^{12}$ см⁻². При этом было показано, что поверхностно-плотные массивы КТ могут также накапливаться вдоль оси роста, что является еще одним преимуществом для реализации достаточно высокого коэффициента усиления.

Оптические исследования показали отсутствие характерного для структур второго типа коротковолнового сдвига линии фотолюминесценции [4]. Уменьшение размеров КТ снимает запрет на непрямую рекомбинацию в обратном k -пространстве. Вместе с этим малая величина мощности отталкивающего потенциала, и с другой стороны значительное увеличение кулоновского взаимодействия между носителями заряда вследствие понижения размерности системы, приводит к эффективной локализации электрона и дырки в одной пространственной области.

Таким образом, КТ Ge в матрице Si проявляют свойства, благодаря которым становится возможным решать не только задачи прикладного характера, но и моделировать поведение широкого круга квантовомеханических систем. Возможность варьирования как размерами КТ, так и толщиной разделяющих их слоев, позволяет получать искусственный объект с управляемыми свойствами. Изменением плотности КТ можно управлять типом гетероперехода, процессом преобразования пространственно-непрямого экситона в прямой и вместе с этим эффективностью излучения одной КТ. Исследования оптических свойств позволяют определить силы осциллятора оптических переходов и тем самым экспериментально проверить решение соответствующей квантовомеханической задачи.

Отсюда следует, что эффективность излучения структур Ge/Si базируется на сумме отдельных свойств, являющихся следствием уменьшения размеров КТ Ge и толщины прослойки между ними, а также возможностью вертикального накопления. Учет этих факторов предопределил цель настоящей работы, а именно, построение модели, которая адекватно описала бы физический механизм роста силы осциллятора оптических переходов.

2. О матричных элементах гамильтониана для возбужденных состояний. Общие положения

Для решения поставленной задачи сначала необходимо определить матричные элементы гамильтониана для возбужденных состояний, выраженных через функции Ванье. Известно, что в зонном приближении волновую функцию основного состояния системы можно представить с помощью одноэлектронных блоховских функций ψ_i следующим образом [5]:

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\mathbf{r}_1) \dots & \psi_{v, k_h}(\mathbf{r}_1) \dots & \psi_N(\mathbf{r}_1) \\ \dots & \dots & \dots \\ \psi_1(\mathbf{r}_N) \dots & \psi_{v, k_h}(\mathbf{r}_N) & \psi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}. \quad (1)$$

Отсюда, возбужденное состояние можно построить, переведя электрон в зону проводимости. Соответствующая волновая функция возбужденного состояния получается из волновой функции основного состояния заменой одной из

$$\Psi_{\mathbf{k}_e \mathbf{k}_h} = N^{-1/2} \sum_{\mathbf{r}_{eh}} e^{i\mathbf{k}_e \mathbf{r}_{eh}} F(\mathbf{k}, \mathbf{r}_{eh}), \quad (8)$$

где

$$F(\mathbf{k}, \mathbf{r}_{eh}) = N^{-1/2} \sum_{\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}} \Phi(\mathbf{l}, \mathbf{l} + \mathbf{r}_{eh}). \quad (9)$$

Здесь $\mathbf{k} = \mathbf{k}_e - \mathbf{k}_h$, а $\Phi(\mathbf{l}, \mathbf{l} + \mathbf{r}_{eh})$ – детерминантная функция, построенная на функциях Ванье, в которой электрон отсутствует в одночастичном состоянии $\phi_1(\mathbf{r} - \mathbf{l}')$ в валентной зоне и помещен в состояние $\phi_2(\mathbf{r} - \mathbf{l}')$ зоны проводимости.

Подставляя (8) в (3) получим

$$\Psi_n = \sum_{\mathbf{r}_{eh}} C(\mathbf{r}_{eh}) F(\mathbf{k}, \mathbf{r}_{eh}), \quad (10)$$

где

$$C(\mathbf{r}_{eh}) = N^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}_e} a_n(\mathbf{k}_e, \mathbf{k}_h) e^{i\mathbf{k}_e \mathbf{r}_{eh}}.$$

Задача заключается в определении коэффициентов $C(\mathbf{r}_{eh})$ как функции $\mathbf{r}_{eh}$. Для этого необходимо построить секулярное уравнение для этих коэффициентов и энергии, а это, в свою очередь требует нахождения отличных от нуля матричных элементов гамильтониана по отношению к функциям возбуждения $F(\mathbf{k}, \mathbf{r}_{eh})$, т.е.

$$H_{\mathbf{l}, \mathbf{r}_{eh}, \mathbf{l}', \mathbf{r}'_{eh}} = \int F^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}'_{eh}) \hat{H}_0 F(\mathbf{k}, \mathbf{r}_{eh}) d\mathbf{v}, \quad (11)$$

где $\hat{H}_0$ равняется сумме одноэлектронных гамильтонианов (7).

Подставляя (9) в (11), получим следующие правила отбора для матричных элементов между детерминантными волновыми функциями

$$\begin{aligned} H_{\mathbf{l}, \mathbf{r}_{eh}, \mathbf{l}', \mathbf{r}'_{eh}} &= N^{-1} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{l}'} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{l} - \mathbf{l}')} \int \Phi^*(\mathbf{l}, \mathbf{l} + \mathbf{r}_{eh}) \hat{H}_0 \Phi(\mathbf{l}', \mathbf{l}' + \mathbf{r}'_{eh}) d\mathbf{v} \\ &\times \delta(\mathbf{l} + \mathbf{r}'_{eh}, \mathbf{l}' + \mathbf{r}_{eh}). \end{aligned} \quad (12)$$

В любом из этих случаев для нахождения матричных элементов можно использовать уравнение (6). Окончательно, для матричного элемента (12) имеем

$$H(\mathbf{r}', \mathbf{l}') = -e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}'_{eh} - \mathbf{r}_{eh})} \times \varepsilon_v(\mathbf{r}'_{eh} - \mathbf{r}_{eh}) + \varepsilon_c(\mathbf{r}'_{eh} - \mathbf{r}_{eh}). \quad (13)$$

Таким образом, если в КТ с координатой $\mathbf{l}'$ появляются электрон и дырка соответственно в состояниях Φ^* и Φ , то переместившись в КТ с координатой $\mathbf{l}$, электрон несет с собой и собственную дырку.

Заметим, что если имеет место оптическое возбуждение системы, то в дипольном приближении (13) примет вид

$$-\varepsilon_v(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) + \varepsilon_c(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \quad (14)$$

Знак минус перед первым членом в (13) связан с отсутствием в детерминантной функции члена, характеризующего электрон.

Таким образом, выражение (14) представляет собой часть матричного элемента гамильтониана между двумя возбужденными состояниями, обусловленными зонной структурой энергетических уровней. Для нахождения $c(\mathbf{r})$ необходимо решить секулярное уравнение с матричными элементами (14) плюс матричный элемент кулоновского взаимодействия, т.е. полный гамильтониан системы представляет собой $\hat{H} = \hat{H}_0 + V(\mathbf{r})$, где $V(\mathbf{r})$ отвечает кулоновскому взаимодействию электрона и дырки.

Действительно, формирование сверхрешетки вследствие вертикального накопления приводит к образованию минизонного энергетического спектра в зоне проводимости Si. В случае появления в матрице Si неравновесных электронов и дырок, захватывающихся в потенциальные ямы Ge, возникает дополнительный кулоновский потенциал, притягивающий электрон к локализованной дырке. Континуальное приближение работает в том случае, если наименьший резонансный интеграл перекрытия, связывающий соседние ямы, больше энергии кулоновского взаимодействия на расстоянии одного периода сверхрешетки (экситон Ванье–Мотта) [5,6].

3. Сила осциллятора экситонного поглощения Ge КТ в матрице Si

Здесь будет рассмотрен противоположный случай, в котором взаимодействие электрона и дырки очень велико, если они расположены в одной и той же пространственной области, занимаемой Ge КТ, и пренебрежимо мало, если они возбуждены в удаленных друг от друга КТ (экситон Френкеля) [5,6]. В этих условиях естественно полагать, что $V(\mathbf{r})$ изменяется очень быстро.

Представим многослойную гетероструктуру вертикально накопленных КТ Ge в матрице Si в виде одномерной цепочки туннельно-связанных идентичных КТ (рис.1). Для описания волновых функций примесных атомов был разработан метод [5,6], который может быть применен в том случае, когда $V(\mathbf{r})$ изменяется так быстро, что можно считать $V(\mathbf{r})$ отличным от нуля только в пределах одной ячейки сверхрешетки (СР). Следуя этому методу, применим разложение волновой функции электрона и дырки через функцию возбуждения в виде (10) и найдем, используя (14), следующее уравнение для определения коэффициентов $C(\mathbf{l})$:

$$\sum_{\mathbf{l}} [-\varepsilon_v(\mathbf{l}-\mathbf{l}') + \varepsilon_c(\mathbf{l}-\mathbf{l}') - V(\mathbf{l},\mathbf{l}')\delta_{\mathbf{l},\mathbf{l}'} - E] C(\mathbf{l}') = 0, \quad (15)$$

где $V(\mathbf{l},\mathbf{l}')$ – матричный элемент кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой в функциях Ванье, E – энергия возбуждения, измеряемая от основного состояния системы.

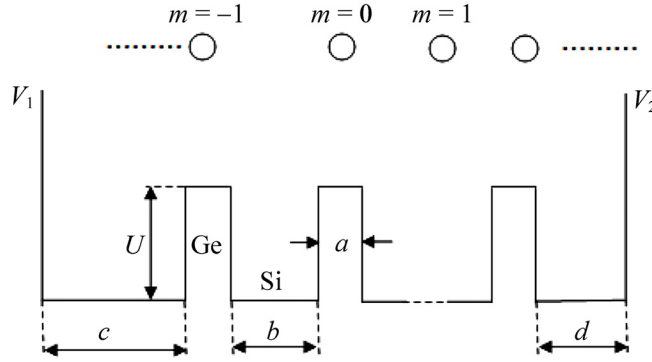


Рис.1.

Возбужденную КТ поместим в начало координат $m = 0$ и введем обозначение $m = (l - l') / a$, где $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Тогда из (15), как и в [7], получим уравнения, определяющие коэффициенты $C(m)$, которые будут удовлетворять уравнению Шредингера для собственных значений E :

$$\varepsilon(0)C(m) + \varepsilon(1)[C(m+1) + C(m-1) + \dots = EC(m)], \quad m \neq 0, \quad (16a)$$

$$[\varepsilon(0) + V(0)]C(0) + \varepsilon(1)[C(1) + C(-1)] + \dots = EC(0), \quad m = 0. \quad (16b)$$

Здесь

$$\varepsilon(0) = -\varepsilon_v(0) + \varepsilon_c(0), \quad m = 0,$$

$$\varepsilon(1) = -\varepsilon_v(1) + \varepsilon_c(1), \quad m = 1,$$

$\varepsilon(0)$ и $\varepsilon(1)$ физически означают энергии возбуждения E для изолированной КТ и для случая слабого взаимодействия между ближайшими соседями, соответственно.

Очевидно, что решение уравнения (16a) необходимо искать в виде

$$C(m) = e^{ikma}. \quad (17)$$

Подставляя (17) в (16a) для энергий возбуждения, получим

$$E = \varepsilon(0) + 2\varepsilon(1)\cos ka. \quad (18)$$

Из уравнения (16b) видно, что локальный потенциал $V(0)$ уменьшает энергию возбуждения E изолированной КТ, выводя из резонанса по отношению к остальным КТ сверхрешетки. Этот случай соответствует ситуации, когда E может оказаться вне зоны, что будет соответствовать минимальному k . Для анализа этой проблемы заменим $k \rightarrow i\gamma$, что приведет к затуханию, а не распространению волн. Таким образом, допустим, что

$$C(m) = e^{\gamma m a} \quad \text{для } m \leq 0, \quad (19)$$

$$C(m) = e^{-\gamma m a} \quad \text{для } m \geq 0.$$

Уравнение (16а) для $C(m)$ удовлетворяется при выполнении энергетического соотношения (18), за исключением уравнения (16б) для $m = 0$. Для затухающих волн выражение (18) принимает вид

$$E = \varepsilon(0) + 2\varepsilon(1) + \text{ch}\gamma a. \quad (20)$$

Уравнение (16б) для $m = 0$ удовлетворяется при условии, когда

$$\gamma = \frac{1}{a} \text{arsh} \left[\frac{V(0)}{2\varepsilon(1)} \right]. \quad (21)$$

Для $V(0) < 0$ необходимо, чтобы $2\varepsilon(1)$ было отрицательным, тогда γ будет положительным и $C(m)$ уменьшается по мере удаления от узла $m = 0$.

Энергию локализованного состояния находим подстановкой (21) в (20), где знак плюс перед $2\varepsilon(1)$ заменяется на минус, что соответствует экситонному состоянию

$$E_2 = \varepsilon(0) - 2\varepsilon(1) \sqrt{1 + \left[\frac{V(0)}{2\varepsilon(1)} \right]^2}. \quad (22)$$

Отсюда видно, что это состояние под действием потенциала $V(0)$ будет выталкиваться из зоны в точке $E_1 = \varepsilon(0) - 2\varepsilon(1)$, соответствующей краю межзонного поглощения.

Эффект отталкивания, а вместе с ним и локализация состояния, усиливаются в структуре с малой шириной минизоны СР. Из (22) видно, что в пределе

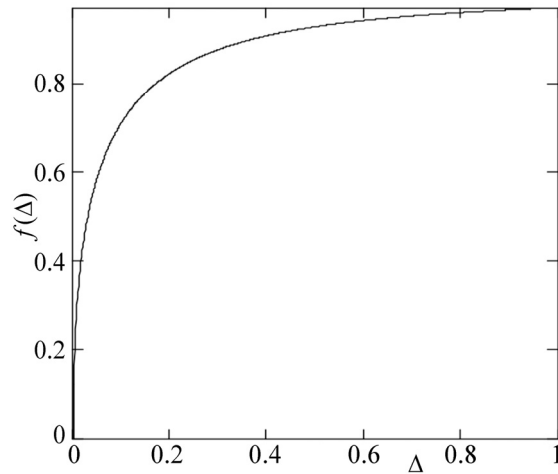


Рис.2.

очень большого $V(0)$ имеем $E = \varepsilon(0) - V(0)$. Так что в пределе большого возмущения или очень узкой минизоны энергия является характерной энергией локализованного решения, для которого $m = 0$.

Таким образом, степень локализации (21) волновой функции и величина $\Delta E = E_1 - E_2$ ее отщепления от энергетической минизоны СР определяется параметром $\lambda = V(0)/(2\varepsilon(1))$.

Заметим, что сумма $C^*(m)C(m)$ для данного m (т.е. электрон и дырка находятся в пределах одной КТ) по всем энергетическим уровням равна единице.

Для выделенного, например, $m = 0$ состояния при большом возмущающем потенциале волновая функция будет спадать как $C(m) = e^{-\gamma m a}$ при $m \neq 0$, так что член с $m = 0$ будет близок к единице, т.е.

$$f(\Delta) = C^*(0)C(0) \approx 1 - 2C^*(1)C(1)$$

или

$$f(\Delta) = 1 - e^{-2\ln(\sqrt{4\Delta(\Delta+1)} + \sqrt{4\Delta(\Delta+1)+1})}, \quad (23)$$

где

$$\Delta = \frac{E_1 - E_2}{4\varepsilon(1)} = \frac{1}{2} \left[(1 + \lambda^2)^{1/2} - 1 \right] \quad (24)$$

– расстояние, на которое отщепляется дискретное состояние от минизоны к ее ширине. Данные для построения графика зависимости силы осциллятора опти-

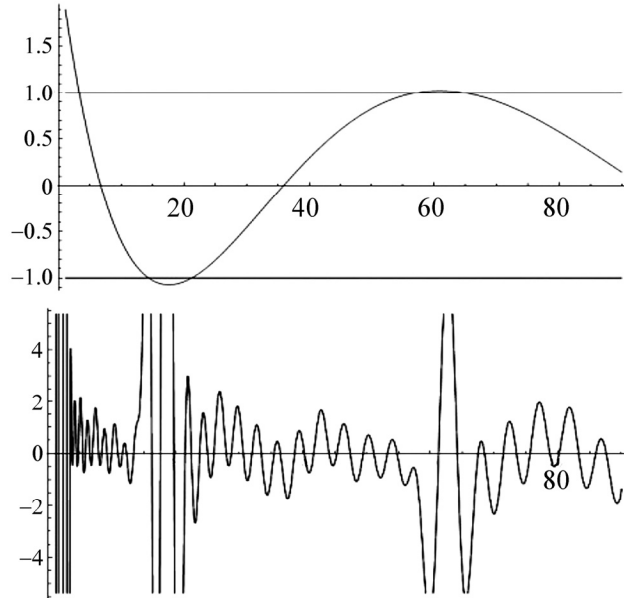


Рис.3.

ческих переходов (23) от величины Δ (рис.2) были получены в результате численных вычислений λ при различных значениях параметров СР. В качестве примера приведем график зависимости ширины первой минизоны от типичных значений параметров СР (рис.3): $V_1 = V_2 = U = 90$ МэВ, $n = 10$ – число периодов СР, $a = 0.5$ нм, $b = 11$ нм, $c = 100$ нм, $d = 100$ нм, $m = 0.2 m_0$.

Видно, что если величина отщепления уровня от минизоны составляет 10% от ее ширины, то дискретное состояние будет вбирать в себя 70% силы осциллятора. Таким образом, при дальнейшем увеличении Δ экситонное поглощение практически вбирает в себя всю силу оптического поглощения.

ЛИТЕРАТУРА

1. **О.П. Пчеляков и др.** ФТП, **34**, 128 (2000).
2. **В.Г. Талалаев, А.А. Тонких и др.** ФТП, **46**, 1492 (2012).
3. **А.Е. Жуков.** Лазеры на основе полупроводниковых наноструктур. Элмор, 2007.
4. **А.Г. Макаров и др.** ФТП, **37**, 219 (2003).
5. Оптические свойства полупроводников. Р.Уиллардсона и А.Бира, ред., Москва, Мир, 1970.
6. **А.И. Ансельм.** Введение в теорию полупроводников. Москва, Наука, 1978.
7. **Р. Пантел, Г. Путхоф.** Основы квантовой электроники. Москва, Мир, 1972.

Si-ի ՄԱՏԴԻՑԻ ՄԵՋ ՆԵՐՍՈՒԾԱԾ Ge-ի ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԿԵՏԵՐՈՒՄ
ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ԱՆՑՈՒՄՆԵՐԻ ՈՒԺԻ ԱՃԻ ՄԵԽԱՆԻԶՄԻ ՄԱՍԻՆ

Ա.Ռ. ՄԿՐՏՉՅԱՆ, ԱԼ.Գ. ԱԼԵՔՍԱՆՅԱՆ, Կ.Ս. ԱՐԱՄՅԱՆ, Ա.Ա. ԱԼԵՔՍԱՆՅԱՆ

Տեսականորեն հետազոտված է Si/Ge հետերոկառուցվածքը, որի ակտիվ տիրույթը բաղկացած է գերմանիումի քվանտային կետերից (ՔԿ): Գերմանիումի ՔԿ-ի զանգվածի բարձր խտությունը չի կարող հիմք հանդիսանալ փորձերում դիտվող լյումինեսցենցիայի աճը բացատրելու համար: Մոդելի հիմքում դրված են էքսիտոնի օսցիլյատորի ուժի բարձրացմանը նպաստող պայմանները՝ գերմանիումի ՔԿ-ի մեջ էլեկտրոնային վիճակների «ներձգման» շնորհիվ:

ON MECHANISM OF THE GROWTH OF THE OPTICAL TRANSITIONS STRENGTHS IN Ge QUANTUM DOTS EMBEDDED IN Si MATRIX

A.R. MKRTCHYAN, A.L.G. ALEXANYAN, K.S. ARAMYAN, A.A. ALEXANYAN

The Si/Ge heterostructure the active area of which is composed of Ge quantum dots (QD) is theoretically investigated. The high density of the Ge QD array can not be the dominant feature in the choice of an adequate model that can explain the experimentally observed increase in the intensity of luminescence. In the basis of this model were established conditions conducing to the improvement of the oscillator strength of the exciton due to 'pull' of the electronic states in the Ge QD core.