

УДК 621.315

МЕЖЗОННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ И ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ В НАНОСФЕРИЧЕСКОЙ ЯДРО/СЛОЙ/СЛОЙ ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ InP/InAs/InP

В.А. АРУТЮНЯН, М.А. МКРТЧЯН, Э.М. КАЗАРЯН, Д.Б. АЙРАПЕТЯН*

Российско–Армянский университет, Ереван, Армения

*e-mail: dhayrap82@gmail.com

(Поступила в редакцию 01 ноября 2018 г.)

В приближении изотропной эффективной массы и в режиме сильного размерного квантования теоретически рассмотрены одночастичные состояния носителей заряда в наносферической гетероструктуре InP/InAs/InP. Приведены результаты численных расчетов энергетических уровней носителей заряда при различной толщине квантующего слоя InAs указанной гетерофазной структуры. Показано, что соответствующим выбором толщины слоя возможно добиться желаемого значения и положения уровней размерного квантования носителей заряда в слое. Рассмотрены также межзонные оптические переходы в слое InAs. Рассчитаны значения эффективного уширения ширины запрещенной зоны слоя InAs в зависимости от толщины слоя. Численными расчетами показано, что поглощение имеет резонансный характер и в спектре межзонного поглощения доминируют диагональные переходы. Приведены значения пороговых частот и кривые поглощения для нескольких диагональных переходов с участием как легких, так и тяжелых дырок. Построены также спектры фотолюминесценции в наносферической гетероструктуре InP/InAs/InP для различных температур, близких к комнатной.

1. Введение

Наряду с многими низкоразмерными полупроводниками, в последние два десятилетия интенсивно исследуются также сферически - симметричные полупроводниковые нанорадиальные структуры ядро/ слой/слой [1–5]. Эти гетерофазные композиции комбинируют и синтезируют в себе одновременно ряд свойств квантовых точек и квантовых пленок и в плане приборного применения являются более многофункциональными, чем отдельно взятые одиночные квантовые пленки и квантовые точки [6, 7]. Благодаря своим уникальным физическим свойствам структуры ядро/слой/слой в настоящее время широко используются как в приборах оптоэлектроники и наноэлектроники [6–12], так и в областях современной биологии и медицины [13–17].

Физической основой широкого применения названных наноструктур, как в настоящее время, так и в перспективе, является проявление в них эффекта размерного квантования носителей заряда, благодаря чему такие структуры проявляют ряд новых свойств, принципиально невозможных в массивных образцах. Сферическое ядро/слой/слой композиция с квантовой ямой в первом слое представляют собой широкозонную квантовую точку-ядро, покрытую полупроводником с более узкой запрещенной зоной. Последний в свою очередь покрыт слоем из того же широкозонного материала, что и ядро. Ясно, что для достижения необходимой степени контролируемого управления свойствами подобных структур, наряду с геометрическими размерами и конфигурацией образца, важнейшим фактором является также и выбор материалов компонент данной наноконструкции ядро/слой/слой. Именно соотношениями между характеристиками компонент структуры будут определяться глубина квантовой ямы в первом слое композиции, степень размерного квантования носителей, количество уровней в яме, возможность ионизации ямы и др. Среди этих композиций имеются такие ядро/слой/слой структуры, в которых глубина квантовой ямы для электронных и дырочных состояний примерно одинакова, а сама яма довольно мелкая. Наличие этих факторов делает возможным посредством вариации толщины слоя регулировать как число энергетических уровней в каждой квантовой яме, так и положение самих уровней. Типичным и одним из важных представителей подобных структур является сферическая ядро/слой/слой наноконструкция InP/InAs/ InP. Интерес к этой структуре обусловлен прежде всего тем, что, наряду с другими полупроводниковыми материалами, в плане приборного применения прочное место занимают также полупроводниковые соединения III-V [18–20] и, соответственно, - различные сферически-симметричные ядро/слой/слой структуры III-V/ III-V/ III-V [21, 22].

Благодаря своим индивидуальным свойствам соединения этой группы InP и InAs имеют широкое применение в полупроводниковой электронике как каждое в отдельности, так и в композиции с другими полупроводниковыми соединениями [23–28]. Поэтому несомненный интерес представляет рассмотрение свойств наносферической композиции InP/InAs/InP, в которой проявляются специфика соединений InP и InAs в условиях комбинированного размерного квантования, с одновременным проявлением квантовых размерных эффектов (КРЭ), характерных как для квантованной пленки, так и для квантовой точки. Тем более, что, начиная с определенных размеров образца, размерное квантование носителей в InAs возможно наблюдать в «чистом» виде - в режиме сильного квантования, т.е. без «помех» со стороны кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой [29]. Подобные состояния в квазиодномерных ядро/слой/слой структурах InP/InAs/InP рассмотрены в работах [30–33].

В настоящей работе теоретически рассматриваются состояния носителей заряда в наносферической ядро/слой/слой структуре InP/InAs/InP и, соответственно, спектры межзонного оптического поглощения в этой структуре.

2. Энергетический спектр носителей заряда в структуре InP/InAs/InP

В таблице 1 приведены основные физические характеристики массивных кристаллов InP и InAs.

Табл.1. Основные физические характеристики массивных кристаллов InP и InAs (данные взяты из [29, 34–40])

Материал	a , нм	μ_{lh}/m_0	μ_c/m_0	μ_{hh}/m_0	a_{ex} , нм	E_g , эВ	U^c , эВ
InP	0.58687	0.089	0.08	0.6	11–15	1.344	–4.38
InAs	0.60583	0.026	0.023	0.41	34–36	0.354	–4.9

Здесь μ_c , μ_{lh} , μ_{hh} – эффективные массы электронов, легких и тяжелых дырок, соответственно, m_0 – масса свободного электрона, a – постоянная решетки, E_g – ширина запрещенной зоны массивного образца, U^c – электронное сродство зоны проводимости, a_{ex} – боровский радиус трехмерного экситона.

Как видно из таблицы, для контактирующих материалов энергетический разрыв на границе раздела составляет, соответственно $\Delta U_c = 0.52$ eV для зоны проводимости и $\Delta U_v = 0.47$ eV для валентной зоны. То есть нанослой InAs в рассматриваемой композиции для электронных и дырочных состояний будет представлять собой потенциальную яму конечной и примерно одинаковой глубины.

Внутренний и внешний радиусы слоя InAs обозначим через R_1 и R_2 , соответственно, а величина $L = R_2 - R_1$ является толщиной слоя. Толщина слоя при расчетах будет варьироваться в интервале $L \leq 12$ нм. Из таблицы ясно, что при таких значениях толщины слоя кулоновским взаимодействием между электроном и дыркой в слое можно пренебречь. То есть в рассматриваемом случае для носителей заряда в слое InAs с достаточной точностью будет реализован режим сильного квантования. Все расчеты выполнены в приближении эффективной массы. Квантовая яма в радиальном направлении рассматривается в рамках модели прямоугольной потенциальной ямы конечной глубины. Перейдем теперь к конкретным расчетам.

Для одночастичных состояний потенциальная яма слоя InAs будет следующей:

$$V(r) = \begin{cases} \Delta U, & r \leq R_1, r \geq R_2, \\ 0, & R_1 < r < R_2. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь $\Delta U \equiv \Delta U_c = 0,52$ eV для электронных состояний зоны проводимости и $\Delta U \equiv \Delta U_v = 0,47$ eV для дырочных состояний валентной зоны. Полную волновую функцию в сферических координатах (r, ϑ, φ) ищем в следующем виде:

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = \frac{\chi(r)}{\sqrt{r}} Y_{l,m}(\vartheta, \varphi). \quad (2)$$

Здесь $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$ – нормированные сферические функции, а $l = 0, 1, 2, \dots$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, – орбитальное и азимутальное квантовые числа, соответственно. В приближении изотропной эффективной массы для определения радиальной волновой функции $\chi(r)$ в областях ядро (индексы-1), внутренний слой (индексы-2) и внешний слой (индексы-3), соответственно, получаем следующие уравнения:

$$\rho^2 \frac{d^2 \chi_1(\rho)}{d\rho^2} + \rho \frac{d\chi_1(\rho)}{d\rho} - \left[k_1^2 \rho^2 + \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 \right] \chi_1(\rho) = 0, \quad (3)$$

$$\rho^2 \frac{d^2 \chi_2(\rho)}{d\rho^2} + \rho \frac{d\chi_2(\rho)}{d\rho} + \left[k_2^2 \rho^2 - \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 \right] \chi_2(\rho) = 0, \quad (4)$$

$$\rho^2 \frac{d^2 \chi_3(\rho)}{d\rho^2} + \rho \frac{d\chi_3(\rho)}{d\rho} - \left[k_3^2 \rho^2 + \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 \right] \chi_3(\rho) = 0. \quad (5)$$

Здесь $\rho = r/a_1$; $k_1^2 = \Delta U/E_{un} - \varepsilon$; $k_2^2 = (\mu_2/\mu_1)\varepsilon$; $k_3^2 = k_1^2$; $\varepsilon = E/E_{un}$; E – полная энергия носителя заряда в слое InAs, а значения эффективных массы μ_1 и μ_2 будет выбираться в соответствии с видом носителя заряда.

Решения этих уравнений, удовлетворяющие условию конечности при $r \rightarrow 0$ и обращающиеся в ноль при $r \rightarrow \infty$, даются следующими выражениями [41]:

$$\chi_1(\rho) = A I_{l+1/2}(k_1 \rho), \quad (6)$$

$$\chi_2(\rho) = B_1 J_{l+1/2}(k_2 \rho) + B_2 J_{-(l+1/2)}(k_2 \rho), \quad (7)$$

$$\chi_3(k_3 \rho) = C K_{l+1/2}(k_3 \rho). \quad (8)$$

Здесь $J_\nu(x)$ – функции Бесселя первого рода, а $I_\nu(x)$ и $K_\nu(x)$ – модифицированные функции Бесселя первого и второго рода, соответственно, (функции Инфельда и Макдональда), A, B_1, B_2, C – нормировочные постоянные. Проведя

«сшивку» логарифмических производных функций (6)–(8) на границах ямы (при $r = R_1$ и $r = R_2$), для определения энергетического спектра носителей заряда в слое InAs получаем следующее общее условие:

$$\frac{(a\rho_1)J'_{-(l+1/2)}(a\rho_1) - (b\rho_1)J_{-(l+1/2)}(a\rho_1)\frac{I'_{l+1/2}(b\rho_1)}{I_{l+1/2}(b\rho_1)}}{(a\rho_1)J'_{l+1/2}(a\rho_1) - (b\rho_1)J_{l+1/2}(a\rho_1)\frac{I'_{l+1/2}(b\rho_1)}{I_{l+1/2}(b\rho_1)}} = \frac{(a\rho_2)J'_{l+1/2}(a\rho_2) - (b\rho_2)J_{l+1/2}(a\rho_2)\frac{K'_{l+1/2}(b\rho_2)}{K_{l+1/2}(b\rho_2)}}{(a\rho_2)J'_{-(l+1/2)}(a\rho_2) - (b\rho_2)J_{-(l+1/2)}(a\rho_2)\frac{K'_{l+1/2}(b\rho_2)}{K_{l+1/2}(b\rho_2)}}. \quad (9)$$

Параметры a , b здесь определяются величинами k_1, k_2 и в дальнейшем для каждого конкретного случая их соответствующие значения будут заданы. Штрих над функцией означает ее первую производную по полному аргументу.

Квантовый размерный эффект, как известно, наиболее ярко проявляется для низших энергетических состояний носителей заряда, то есть для не больших значений квантовых чисел. Соответственно, мы будем рассматривать решения уравнения (9) по мере возрастания их числа в зависимости от толщины слоя, то есть будем рассматривать зависимость числа энергетических уровней в квантовой яме в зависимости от ее ширины. Ограничимся рассмотрением тех низших состояний, когда в яме существуют уровни только с $l = 0, l = 1, l = 2$. Приведенные ниже расчеты сделаны для фиксированного значения радиуса ядра $R_1 = 15 \text{ nm}$ ($\rho_1 = 1.25$), а толщина слоя рассматривается в интервале $L \leq 12 \text{ nm}$ ($\lambda = L/a_1 \leq 1$).

2.1. Электронные состояния

Рассмотрим вначале электронные состояния в данной структуре. Параметры в соотношении (9) при этом следующие:

$$a = k_{e,2} = \sqrt{\frac{\mu_{e,2}}{\mu_{e,1}}} \varepsilon_e = \sqrt{0,2875 \varepsilon_e},$$

$$b = k_{e,1} = k_{e,3} = \sqrt{\frac{\Delta U_c}{E_{un}} - \frac{E_e}{E_{un}}} = \sqrt{156,86 - \varepsilon_e}.$$

В таблице 2 приведено изменение числа уровней электронных состояний в слое InAs при изменении толщины слоя в интервале $L \leq 12 \text{ nm}$. Значения L здесь являются максимально возможными значениями толщины слоя, при которых в яме формируется данная группа состояний (n, l) .

Табл.2. Изменение числа электронных уровней в квантовой яме слоя InAs при изменении толщины слоя в интервале $L \leq 12$ nm

Толщина слоя L , nm	Число уровней	Энергия состояния $E_{n,l}$, мэВ
$L = 5.82$	3	$E_{1,0} = 240.9$; $E_{1,1} = 250.1$; $E_{1,2} = 270.2$
$L = 6.24$	4	$E_{1,0} = 222.8$; $E_{2,0} = 517.1$; $E_{1,1} = 232.1$; $E_{1,2} = 248.5$
$L = 6.72$	5	$E_{1,0} = 201.6$; $E_{2,0} = 507.2$; $E_{1,1} = 210.8$; $E_{2,1} = 513.8$; $E_{1,2} = 229.1$
$L = 11.45$	6	$E_{1,0} = 89.8$; $E_{2,0} = 325.2$; $E_{1,1} = 98.1$; $E_{2,1} = 334.8$; $E_{1,2} = 113.7$; $E_{2,2} = 348.1$
$L = 11.86$	7	$E_{1,0} = 84.9$; $E_{2,0} = 310.3$; $E_{3,0} = 517.1$; $E_{1,1} = 93.2$; $E_{2,1} = 318.5$; $E_{1,2} = 108.4$; $E_{2,2} = 335.1$

2.2. Состояния легких дырок

Параметры в соотношении (9) теперь следующие:

$$a = k_{lh,2} = \sqrt{\frac{\mu_{lh,2}}{\mu_{e,1}}} \epsilon_{lh} = \sqrt{0,325 \epsilon_{lh}},$$

$$b = k_{lh,1} = k_{lh,3} = \sqrt{\frac{\mu_{lh,1}}{\mu_{e,1}}} \left(\frac{\Delta U_v}{E_{un}} - \frac{E_{lh}}{E_{un}} \right) = \sqrt{157,73 - 1,1125 \epsilon_{lh}}.$$

Расчеты, проведенные для случая легких дырок в том же интервале изменения толщины слоя InAs ($L \leq 12$ nm), приводят к результатам, очень близким к результатам из таблицы 2, полученным для электронов. Это вполне объяснимо, т.к. для электронов и легких дырок в рассматриваемой композиции близки как значения эффективных масс, так и глубина потенциальной ямы. Здесь мы не будем для легких дырок приводить таблицу, аналогичную таблице 2, а для наглядности приведем значения энергетических уровней для каждого из этих носителей

при фиксированной толщине слоя (в данном случае при $L=5$ nm) (Табл.3).

Небольшое различие (порядка 30 мэВ) между значениями энергий одних и тех же состояний обусловлено, очевидно, несущественной разницей глубин потенциальных ям (50 мэВ) и близостью значений эффективных масс этих носителей.

Табл.3. Энергия электронов в слое InAs сферической наноструктуры InP/InAs/InP для состояний $n = 1; l = 0, 1, 2$ при толщине слоя $L = 5$ nm

Состояния	$n = 1, l = 0$	$n = 1, l = 1$	$n = 1, l = 2$
Энергия электронов E_e , мэВ	285.49	294.41	311.88
Энергия лег. Дырок E_{lh} , мэВ	254.23	262.22	278.16

2.3. Состояния тяжелых дырок

В этом случае имеем

$$a = k_{hh,2} = \sqrt{\frac{\mu_{hh,2}}{\mu_{e,1}}} \varepsilon_{hh} = \sqrt{5,125 \varepsilon_{hh}},$$

$$b = k_{hh,1} = k_{hh,3} = \sqrt{\frac{\mu_{hh,1}}{\mu_{e,1}}} \left(\frac{\Delta U_v}{E_{un}} - \frac{E_{hh}}{E_{un}} \right) = \sqrt{1063,35 - 7,5 \varepsilon_{lh}}.$$

В случае тяжелых дырок, эффективная масса которых на порядок превышает значение эффективной массы легких носителей, число уровней в квантовой яме при том же интервале изменения толщины слоя уже существенно больше, чем в случае электронов и легких дырок.

В таблице 4 приведено изменение числа уровней состояний тяжелых дырок в слое InAs для нескольких интервалов значений ширины квантовой ямы при изменении толщины слоя в интервале $L \leq 12$ nm.

Видно, что, вследствие большого значения эффективной массы тяжелой дырки число уровней размерного квантования этих носителей при рассматриваемых значениях толщины слоя оказывается большим. Мы здесь приведем значения только первых четырех уровней по радиальному числу ($n = 1, 2, 3, 4; l = 0, 1, 2$) при толщине слоя $L=5$ nm (Табл.5).

Видно, что на основе приведенных данных для рассматриваемого образца всегда можно выбрать такое значение толщины слоя, когда совокупное число всех состояний носителей заряда в квантовых ямах v - и c -зон является

Табл.4. Изменение числа уровней тяжелых дырок в квантовой яме слоя InAs при изменении толщины слоя в интервале $L \leq 12$ nm

Толщина слоя L , nm	$L = 5.58$	$L = 8.39$	$L = 9.79$	$L = 11.21$
Число уровней	15	21	24	27
Состояния	$n = 1 - 5, l = 0;$ $n = 1 - 5, l = 1;$ $n = 1 - 5, l = 2$	$n = 1 - 7, l = 0;$ $n = 1 - 7, l = 1;$ $n = 1 - 7, l = 2$	$n = 1 - 8, l = 0;$ $n = 1 - 8, l = 1;$ $n = 1 - 8, l = 2$	$n = 1 - 9, l = 0;$ $n = 1 - 9, l = 1;$ $n = 1 - 9, l = 2$

минимальным из возможных. То есть, это то значение толщины слоя, при котором квантовый размерный эффект в слое будет иметь место одновременно для всех видов носителей заряда и в максимально возможном своем проявлении. Например, при толщине слоя $L = 6$ nm в слое InAs одновременно возможно наличие 3-х электронных уровней, 3-х уровней легких дырок и 15-ти уровней размерного квантования тяжелых дырок, при $L = 11$ nm – по 7 уровней электронов и легких дырок и 27 уровней тяжелых дырок и т.п.

Табл.5. Первые четыре уровня тяжелых дырок в слое InAs сферической наноструктуры InP/InAs/InP для состояний $n = 1, 2, 3, 4;$ $l = 0, 1, 2$ при толщине слоя $L = 5$ nm

Состояния Энергия	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$
$E_{hh,1l}$, meV	28.21	28.74	29.77
$E_{hh,2l}$, meV	109.79	110.06	111.81
$E_{hh,3l}$, meV	239.18	239.77	240.37
$E_{hh,4l}$, meV	397.93	398.21	401.12

3. Межзонное оптическое поглощение

Для количественного описания межзонного оптического поглощения воспользуемся формализмом сил осцилляторов. Введем безразмерную силу осциллятора [42–44]

$$F_{c,v} = \frac{f_{c,v}}{f_0} = \int_V \Psi_c^*(\mathbf{r}) \Psi_v(\mathbf{r}) dV. \quad (10)$$

Здесь f_0 – сила осциллятора межзонных переходов в массивном образце, $f_{c,v}$ – сила осциллятора переходов в квантующем слое композиции ядро/слой/среда, $c = \{n_c, l_c, m_c\}$ и $v = \{n_v, l_v, m_v\}$ – набор квантовых чисел, описывающих состояния электронов в зоне проводимости (c) и валентной зоне (v), соответственно, V – нормировочный объём системы. Расчеты относительно поглощения мы проведем для толщины слоя $L = R_2 - R_1 = 12$ нм. Выбор именно этого значения обусловлен тем, что для рассматриваемой композиции InP/InAs/InP толщина $L = 12$ нм является тем пределом, при котором состояния носителей заряда в слое InAs еще можно рассматривать в режиме сильного квантования.

Наличие в выражении (2) для полной огибающей функции шаровых функций приводит к следующим правилам отбора по орбитальному и азимутальному числам:

$$l_c = l_v; |m_c| = |m_v|. \quad (11)$$

В таблицах 6–7 приведены значения безразмерных сил осцилляторов $F_{c,v}$ для диагональных и недиагональных по радиальному числу n межзонных переходов в слое InAs сферической наноконпозиции InP/InAs/InP, соответственно.

Табл.6. Значения безразмерных сил осцилляторов $F_{c,v}$ для диагональных по радиальному числу n межзонных переходов в слое InAs сферической наноконпозиции InP/InAs/InP при толщине слоя $L = 12$ nm

Переходы $ n_v, l_v\rangle \rightarrow n_c, l_c\rangle$	Сила осциллятора $F_{c,v}$ Легкие дырки	Сила осциллятора $F_{c,v}$ Тяжелые дырки
$ 1,0\rangle \rightarrow 1,0\rangle$	0.999998	0.996892
$ 2,0\rangle \rightarrow 2,0\rangle$	0.999996	0.9839082
$ 1,1\rangle \rightarrow 1,1\rangle$	0.999999	0.996842
$ 2,1\rangle \rightarrow 2,1\rangle$	0.9999963	0.9831066
$ 1,2\rangle \rightarrow 1,2\rangle$	0.9999998	0.9965737

Данные, приведенные в Таблицах 6–7 наглядно показывают, что при межзонных оптических переходах в рассматриваемой структуре по радиальному квантовому числу также с достаточной точностью выполняется правило отбора

$$n_c \approx n_v. \quad (12)$$

Меньшие значения сил осцилляторов при переходах из состояний тяжелых дырок по сравнению со случаем переходов из состояний легких дырок обусловлены большим различием между значениями эффективной массы тяжелой дырки и электрона, вследствие чего интеграл перекрытия в (10) в случае тяжелых дырок оказывается меньше, чем в случае легких дырок.

Табл.7. Значения безразмерных сил осцилляторов $F_{c,v}$ для недиагональных по радиальному числу n межзонных переходов в слое InAs сферической наноконструкции InP/InAs/InP при толщине слоя $L = 12$ nm

Переходы $ n_v, l_v\rangle \rightarrow n_c, l_c\rangle$	Сила осциллятора $F_{c,v}$ Легкие дырки	Сила осциллятора $F_{c,v}$ Тяжелые дырки
$ 1,0\rangle \rightarrow 2,0\rangle$	0.2395398	0.1270261
$ 1,1\rangle \rightarrow 2,1\rangle$	0.2099035	0.0787562
$ 1,2\rangle \rightarrow 2,2\rangle$	0.1277898	0.0188499

4. Обсуждение результатов

Обсудим теперь результаты проделанных в работе теоретических расчетов. Данные, приведенные в Табл. 2–5, позволяют заключить, что для рассматриваемой сферической ядро/слой/слой структуры InP/InAs/InP при толщине слоя $L \leq 12$ нм в слое InAs будет наблюдаться размерное квантование носителей заряда, причем в режиме сильного квантования, когда экситонными эффектами можно реально пренебречь. Варьируя в указанных пределах толщиной слоя, можно управляемым образом менять и регулировать число и положение уровней размерного квантования носителей заряда в слое InAs.

Вследствие размерного квантования межзонное поглощение в квантующем слое имеет резонансный характер. Наибольшей интенсивностью обладают диагональные межзонные переходы, для которых приведенная сила осцилляторов $F_{c,v} \approx 1$ (см.табл.6). Недиагональные переходы сильно подавлены ($F_{c,v} \ll 1$), при этом интенсивность переходов убывает как с увеличением степени недиагональности, так и с увеличением значений квантовых чисел (см.табл.7). Так что с практической точки зрения в рассматриваемой системе реальный интерес представляют именно диагональные по радиальному числу межзонные оптические переходы.

Частотная зависимость коэффициента поглощения при межзонных переходах в слое будет определяться соотношением [42–44]

$$\alpha(\omega) = \alpha_0 \omega \sum_{c,v} F_{c,v}^2 \delta(\hbar\omega - E_g^L - E_c - E_v). \quad (13)$$

Здесь α_0 – величина, пропорциональная квадрату модуля матричного элемента дипольного момента, построенного на блоховских амплитудах v - и c -зон, $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака.

Пороговая частота этих переходов определяется из соотношения

$$\hbar\omega_{c,v} = E_g^L + E_c + E_v = E_g^L + \Delta_g^{c,v}. \quad (14)$$

Табл.8. Эффективное уширение запрещенной зоны $\Delta_g^{c,v}$ слоя InAs для диагональных межзонных переходов при $L = 12$ nm

переходы уширение	$ 1,0\rangle \rightarrow 1,0\rangle$	$ 1,1\rangle \rightarrow 1,1\rangle$	$ 1,2\rangle \rightarrow 1,2\rangle$	$ 2,0\rangle \rightarrow 2,0\rangle$	$ 2,1\rangle \rightarrow 2,1\rangle$
$\Delta_g^{c, lh}$, eV	0.1563	0.17641	0.21616	0.57599	0.59578
$\Delta_g^{c, hh}$, eV	0.08854	0.09981	0.12209	0.3276	0.33872

Здесь E_g^L – ширина запрещенной зоны массивного образца InAs, E_c , E_v энергии размерного квантования носителей заряда в зоне проводимости и валентной зоне, соответственно, а индексы c, v , как и выше, представляют совокупность квантовых чисел электронных и дырочных состояний, соответственно, ω – частота падающего света. В таблицах 8 и 9 приведены значения эффективного уширения запрещенной зоны $\Delta_g^{c,v} = E_v + E_c$ нанослоя InAs, для некоторых диагональных и недиагональных переходов, соответственно.

Табл.9. Эффективное уширение запрещенной зоны $\Delta_g^{c,v}$ слоя InAs для недиагональных межзонных переходов при $L = 12$ nm

переходы уширение	$ 1,0\rangle \rightarrow 2,0\rangle$	$ 1,1\rangle \rightarrow 2,1\rangle$	$ 1,2\rangle \rightarrow 2,2\rangle$
$\Delta_g^{c, lh}$, eV	0.37841	0.39833	0.43783
$\Delta_g^{c, hh}$, eV	0.31066	0.32173	0.34381

На практике реальное уширение спектральных линий будет учтено с помощью замены δ – функции в выражении для $K(\omega)$ лоренцевским контуром с Γ – параметром Лоренца:

$$\delta(\hbar\omega_{c,v} - E_g^L - E_c - E_v) \rightarrow \frac{\Gamma}{(\hbar\omega_{c,v} - E_g^L - E_c - E_v)^2 + \Gamma^2}. \quad (15)$$

Для расчетов в данном случае полагаем $\Gamma = 4$ мэВ [44].

На Рис.1,2 представлены кривые межзонного поглощения в рассматриваемом слое InAs соответственно для случаев диагональных и недиагональных межзонных переходов из состояний легких и тяжелых дырок валентной зоны в электронные состояния зоны проводимости.

Видно, что пики поглощения наблюдаются на резонансных пороговых частотах $\hbar\omega_{c,v} = E_g^L + \Delta_g^{c, lh}$, $\hbar\omega_{c,v} = E_g^L + \Delta_g^{c, hh}$, определяемых данными из таблиц 1,8.

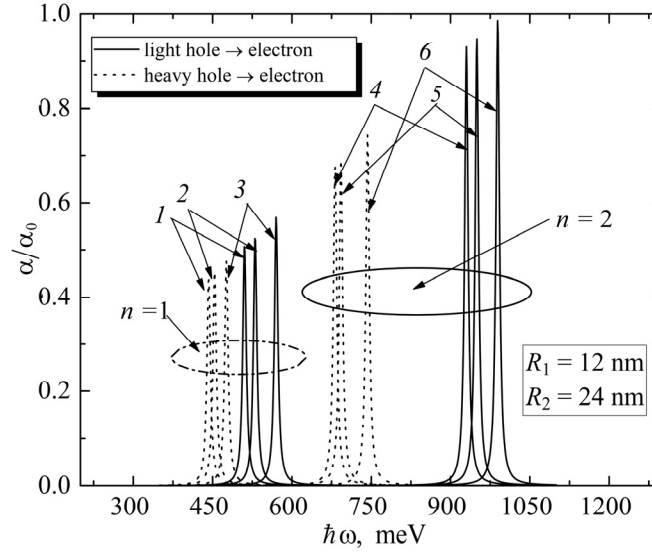


Рис.1. Зависимость кривой поглощения от частоты падающего света для диагональных переходов: (1) $|1,0\rangle \rightarrow |1,0\rangle$, (2) $|1,1\rangle \rightarrow |1,1\rangle$, (3) $|1,2\rangle \rightarrow |1,2\rangle$, (4) $|2,0\rangle \rightarrow |2,0\rangle$, (5) $|2,1\rangle \rightarrow |2,1\rangle$, (6) $|2,2\rangle \rightarrow |2,2\rangle$.

5. Фотолюминесценция

Следующим этапом исследования оптических свойств структуры InP/InAs/InP является расчет спектров фотолюминесценции (ФЛ), то есть зависимость интенсивности ФЛ от частоты падающего света для диагональных и недиагональных переходов.

Спектры ФЛ вычисляются с использованием соотношения (16) взятого из работ [27, 28]:

$$R(\hbar\omega) = \frac{1}{kT} \cdot R_0 \cdot \hbar\omega \cdot K(\hbar\omega) \cdot \frac{f_c(1-f_v)}{f_c - f_v}, \quad (16)$$

где R_0 – величина, пропорциональная квадрату модуля матричного элемента

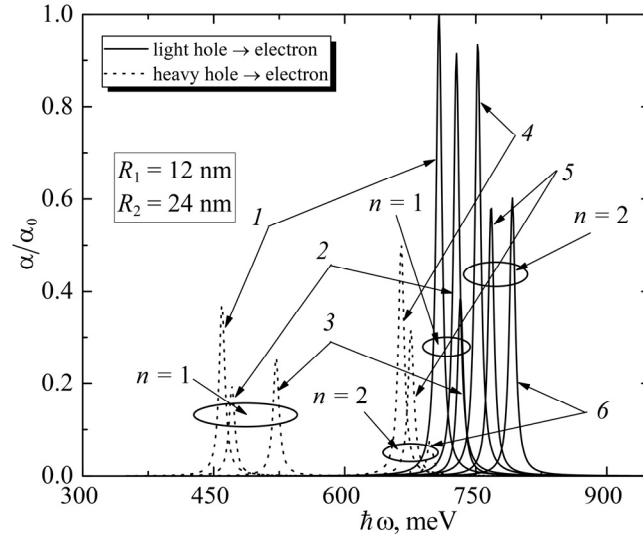


Рис.2. Зависимость кривой поглощения от частоты падающего света для недиагональных переходов: (1) $|2,0\rangle \rightarrow |1,0\rangle$, (2) $|2,1\rangle \rightarrow |1,1\rangle$, (3) $|3,2\rangle \rightarrow |1,2\rangle$, (4) $|1,0\rangle \rightarrow |2,0\rangle$, (5) $|1,1\rangle \rightarrow |2,1\rangle$, (6) $|2,1\rangle \rightarrow |2,2\rangle$.

дипольного момента, взятого по блоховским функциям, а f_c и $(1 - f_v)$ – вероятности того, что состояние зоны проводимости заполнено и состояние валентной зоны пусто, соответственно. При высоких температурах выражение

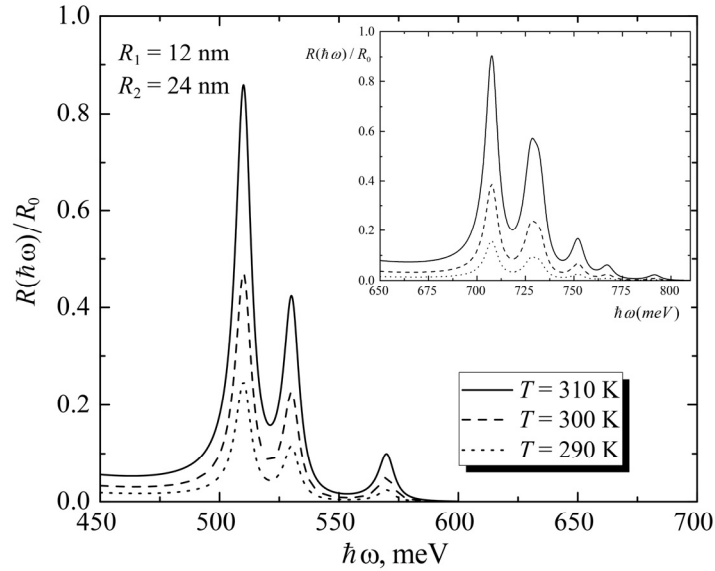


Рис.3. Зависимость интенсивности ФЛ для диагональных (вставка: для недиагональных) межзонных переходов $lh \rightarrow e$ от частоты падающего света.

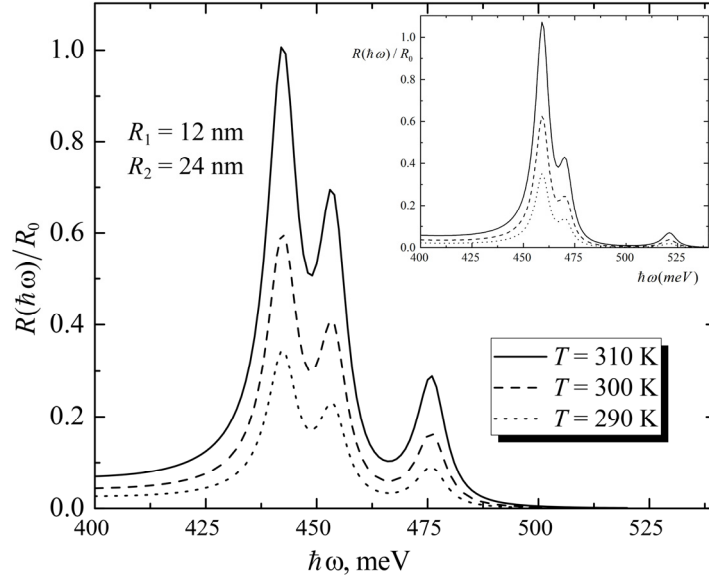


Рис.4. Зависимость интенсивности ФЛ для диагональных (вставка: для недиагональных) межзонных переходов $hh \rightarrow e$ от частоты падающего света.

$f_c(1-f_v)/(f_c - f_v)$ переходит в соотношение Больцмана.

Вычислим кривую ФЛ для температур близких к комнатной. На Рис.3,4 представлены кривые ФЛ в рассматриваемом слое соответственно для случаев диагональных и недиагональных межзонных переходов из состояний легких и тяжелых дырок валентной зоны в электронные состояния зоны проводимости.

6. Заключение и выводы

Предложенная модель физически адекватно описывает одночастичные состояния в сферической гетерофазной структуре InP/InAs/InP и позволяет выявить особенности квантового размерного эффекта в нанослое InAs в режиме сильного квантования, когда влиянием экситонных эффектов в слое можно пренебречь. В интервале значений толщины квантующего слоя InAs $L \leq 12$ нм, варьируя толщиной слоя можно регулируемым образом управлять числом и положением уровней размерного квантования носителей в слое. Из сказанного следует, что, варьируя толщиной слоя можно управляемым образом менять ширину запрещенной зоны слоя, и, соответственно, получить возможность пропускания или задержания слоем InAs световой волны нужной частоты.

Статья выполнена в Российско-Армянском (Славянском) университете за счет средств, выделенных в рамках субсидии МОН РФ на финансирование научно-исследовательской деятельности РАУ.

ЛИТЕРАТУРА

1. **N.G. Aghekyan, E.M. Kazaryan, A.A. Kostanyan, H.A. Sarkisyan.** Superlattices and Microstructures, **50**, 199 (2011).
2. **A. Ferron, P. Serra, O. Osenda.** Phys. Rev. B, **85**, 165322 (2012).
3. **В.А. Арутюнян, Д.Б. Айрапетян, Д.А. Багдасарян.** Изв. НАН Армении, Физика, **51**, 471 (2016).
4. **В.А. Арутюнян, Д.Б. Айрапетян, Э.М. Казарян.** Изв. НАН Армении, Физика, **53**, 65 (2018).
5. **V. Harutryunyan.** Effect of Static Electric Fields on the Electronic and Optical Properties of Layered Semiconductor Nanostructures, PART I Effect of Static Electric Fields on the Electronic Properties of Layered Semiconductor Nanostructures, Bentham Science, 2015.
6. **M. Henini.** Handbook of Self Assembled Semiconductor Nanostructures for Novel Devices in Photonics and Electronics, Elsevier, 2011.
7. **A.M. El-Toni, M.A. Habila, J.P. Labis, Z.A. Othman, M. Alhoshan, A.A. Elzatahry, F. Zhang.** Nanoscale, **8**, 2510 (2016).
8. **J. Berezowsky, O. Gywat, F. Meier, D. Battaglia, X. Peng, D.D. Awschalom,** Nature Physics, **2**, 831 (2006).
9. **D.T. Cat, A. Pucci, K. Wandlet,** Physics and Engineering of New Materials, Springer, Berlin-Heidelberg, 2009.
10. **S. Brovelli, R.D. Schaller, S.A. Crooker, F. Garcia-Santamaria, Y. Chen, R. Vishvanatha, J.A. Hollingsworth, H. Htoon, V.I. Klimov.** Nature Commun., **2**, Article Number 280 (2011).
11. **A.M. Smith, L.A. Lane, S. Nie.** Nature Commun., **5**, Article number: 4506 (2014).
12. **K. Li,** Nanotechnology, **1**, 482 (2014).
13. **C.S. S. R. Kumar,** (Ed.), Semiconductor nanomaterials. John Wiley & Sons; pp. 393-427 (2010).
14. Micro Systems and Devices for (Bio)chemical Processes, Jr: Chemical engineering, vol.38, San Diego, Academic Press, 2010.
15. **M. Rai, N. Duran,** (Eds.), Metal Nanoparticles in Microbiology. Heidelberg-Dordrecht-London-New York: Springer Science & Business Media, 2011.
16. **N. Waiskopf, R. Rotem, I. Shweky, L.Yedidya , H. Soreq, U. Banin,** BioNanoScience, **3**, 1 (2013).
17. **S. Ogli, A. Rostani.** IET Nanobiotechnology, **7**, 140 (2013).
18. **J. Li, D. Wang, R. R. LaPierre,** Advances in III-V Semiconductor Nanowires and Nanodevices, Bentham Science (2011).
19. **S. Mokkapati, Ch. Jagadish.** Materials today, **12**, 22 (2009).
20. **M. Fang, N. Han, F. Wang, Z-X. Yang, S.P. Yip, G. Dong, J.J. Hou, Y. Chueh, J.C. Ho.** Journal of Nanomaterials, **2014**, Article ID 702859 (2014).

21. PATENT WO 2007020416 A1, 22 Feb., 2007.
22. PATENT CA 2617972 C, 15 July, 2014.
23. **K.J. Bachman.** Annual Review of Materials Science, **11**, 441 (1981).
24. **I. Gyuro.** III-Vs Review, **9**, 30 (1996).
25. **Ch. Ippen, T. Greco, A. Wedel.** Journ. Inf. Displ., **13**, 91 (2012).
26. **L. Froberg.** Growth, Physics, and Device Applications of InAs-based Nanowires, Lund university, Sweden, 2008, 84 p.
27. **R. Contreras-Guerrero, S. Wang, M. Edirisooriya, W. Priyantha, J.S. Rojas-Ramirez, K. Bhuwalka, G. Doornbos, M. Holland, R. Oxland, G. Vellianitis, M. van Dal, B. Duriez, M. Passlack, C.H. Diaz, R. Droopad.** Journ. of Crystal Growth, **378**, 117 (2013).
28. **K. Xu, Y. Qi, Z. Gao, J. Li, X. Wang, Y. Zhang, Z. Han, E. Gao.** Integrated Ferroelectrics, **167**, 205 (2015).
29. **V.I. Klimov.** Semiconductor and Metal Nanocrystals: Synthesis and Electronic and Optical Properties, CRC Press, 2003, 500p.
30. **P. Mohan, J. Motohisa, T. Fukui.** Appl. Phys. Lett., **88**, 013110 (2006).
31. **P. Mohan, J. Motohisa, T. Fukui.** Appl. Phys. Lett., **88**, 133105 (2006).
32. **M. Helmi, N. Alouane, N. Chauvin, C. Chevallier.** Nanotechnology, **22**, 405702 (2011).
33. **C.L. dos Santos, P. Piquini.** Journ. Appl. Phys., **111**, 054315 (2012).
34. <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/InP/basic.html>
35. <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/InP/bandstr.html>
36. **W.E. Buhro, V.L. Colvin.** Nature Materials, **2**, 138 (2003).
37. **Y. Wang, X. Yang, T. C. He, Y. Gao, H. V. Demir, X. W. Sun, H.D. Sun.** Appl. Phys. Lett., **102**, 021917 (2013).
38. <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/InAs/basic.html>
39. <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/InAs/bandstr.html>
40. **M.H. Sun, E.S.P. Leong, A.H. Chin, C.Z. Ning, G.E. Cirlin, Yu.B. Samsonenko, V.G. Dubrovskii, L. Chuang, C. Chang-Hasnain.** Nanotechnology, **21**, 335705 (2010).
41. **М. Абрамовиц, И. Стиган.** Справочник по специальным функциям, М., 1979. 830 с.
42. **В.Н. Неверов, А.Н. Титов.** Физика Низкоразмерных систем, УГУ им. А.М. Горького, Екатеринбург, 2008, ст. 48-57.
43. **Л.Е. Воробьев, Е.Л. Ивченко, Д.А. Фирсов, В.А. Шалыгин.** Оптические свойства наноструктур, Санкт-Петербург, Наука, 2001, ст. 88-95.
44. **Э.М. Казарян, А.А. Костанян, А.А. Саркисян.** Изв. НАН Армении, Физика, **42**, 218 (2007).
45. **P.K. Basu,** Theory of Optical Processes in Semiconductors, Clarendon Press, Oxford, 1997, 464pp.

ՄԻՋԳՈՏԻԱԿԱՆ ԿԼԱՆՈՒՄԸ ԵՎ ՖՈՏՈԼՅՈՒՄԻՆԵՍԵՆՑԻԱՆ
ՆԱՆՈԳԼԴԱՅԻՆ InP/InAs/InP ՄԻՋՈՒԿ/ՇԵՐՏ/ՇԵՐՏ
ՀԵՏԵՐՈԿԱՌՈՒՅՎԱԾՔՈՒՄ

Վ.Ա. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Մ.Ա. ՄԿՐՏՅԱՆ, Է.Մ. ՂԱԶԱՐՅԱՆ, Դ.Բ. ՀԱՅՐԱՊԵՏՅԱՆ

Իզոտրոպ արդյունաբար զանգվածի մոտավորության շրջանակներում և ուժեղ չափային քվանտացման ռեժիմում տեսականորեն դիտարկել են լիցքակիրների մեկմասնիկային նվիճակները նանոգնդային InP/InAs/InP հետերոկառուցվածքում: Բերվել են քվանտացնող InAs շերտի հետերոկառուցվածքային համակարգի տարբեր հաստությունների համար լիցքակիրների էներգիական մակարդակների թվային հաշվարկները: Ցույց է տրվել, որ շերտի համապատասխան հաստության ընտրությամբ կարելի է ստանալ շերտում գտնվող լիցքակրի էներգիական մակարդակի ցանկալի արժեքը և դիրքը: Դիտարկվել են նաև միջգոտիական օպտիկական անցումները InAs շերտում: Հաշվարկվել են InAs շերտի արգելված գոտու արդյունաբար լայնացման արժեքը՝ կախված շերտի հաստությունից: Թվային հաշվարկներով ցույց է տրվել, որ կլանումը ունի ռեզոնանսային բնույթ և միջգոտիական կլանման սպեկտրում գերակշռում են անկյունագծային անցումները: Բերվել են եզրային հաճախությունների արժեքները և կլանման կորերը ինչպես թեթև, այնպես էլ ծանր խոռոչների մասնակցությամբ մի քանի անկյունագծային անցումների համար: Կառուցվել են նաև նանոգնդային InP/InAs/InP հետերոկառուցվածքի ֆոտոլյումինեսցենցիայի սպեկտրը սենյակայինին մոտ տարբեր ջերմաստիճանների համար:

INTERBAND ABSORPTION AND PHOTOLUMINESCENCE IN
NANOSPHERICAL InP/InAs/InP CORE/SHELL/SHELL
HETEROSTRUCTURE

V.A. HARUTYUNYAN, M.A. MKRTCHYAN,
E.M. KAZARYAN, D.B. HAYRAPETYAN

Single-particle states of charge carriers in a nanospherical InP/InAs/InP heterostructure are theoretically considered in the isotropic effective mass approximation and in the regime of strong size quantization. Results of numerical calculations of the energy levels of charge carriers at different thicknesses of the quantizing InAs layer of the indicated heterophase structure are presented. It is shown that it is possible to achieve the desired value and position of the size quantization levels of charge carriers in the layer by appropriate choice of the layer thickness. Interband optical transitions in the InAs layer are also considered. Values of the effective broadening of the band gap of the InAs layer as a function of the layer thickness are calculated. It is shown by numerical calculations that the absorption has a resonant character and that diagonal transitions dominate in the spectrum of the interband absorption. Values of threshold frequencies and absorption curves for several diagonal transitions involving both light and heavy holes are given. The photoluminescence spectra in the spherical InP/InAs/InP nanoheterostructure were also constructed for various temperatures close to room temperature.