

РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ЭКСИТОНА В НАПРЯЖЕННЫХ КЯ СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

Авруцкий И. А., Сычугов В. А., Усевич Б. А.

Получены аналитические выражения, позволяющие легко рассчитывать энергию связи экситона в квантовой яме (КЯ).

Расчитаны энергия связи экситона и спектральное положение экситонного пика для напряженных КЯ структур на основе $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ в диапазоне ширины ямы 5—100 Å и x до 0.5.

Определены в зависимости от длины волны, соответствующей экситонному пику, оптимальные параметры КЯ, обеспечивающие максимальную энергию связи экситона.

В последнее время интерес к использованию квантовых ям (КЯ) и сверхрешеток (СР) в различных оптоэлектронных устройствах неуклонно растет [1]. Он обусловлен большими величинами электро- и нелинейно-оптических коэффициентов, присущих таким структурам. Значительное количество работ посвящено теоретическому и экспериментальному исследованиям структур на основе соединений $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Однако рабочие длины волн таких устройств лежат в диапазоне 0.85—0.9 мкм. Для работы в более длинноволновой области, перспективной для оптических систем связи, лучше подходят соединения $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, что обусловлено малой шириной запрещенной зоны в чистом InAs . В настоящее время эти структуры теоретически недостаточно исследованы, что связано с рядом их особенностей по сравнению с $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$: эффективные массы носителей в GaAs и InAs значительно различаются, а периоды кристаллических решеток этих материалов в отличие от системы $\text{AlAs}-\text{GaAs}$ не согласованы.

Большие значения электрооптических и нелинейных коэффициентов в структурах с КЯ наблюдаются вблизи экситонных пиков поглощения. В КЯ в отличие от однородных полупроводников экситоны существуют даже при комнатной температуре и в достаточно больших электрических полях ($\approx 10^5$ В/см), что и обуславливает уникальные электрооптические свойства структур с КЯ [2]. В настоящее время существует несколько работ, посвященных теоретическому и экспериментальному определению энергии связи экситона в КЯ на основе $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [3, 4]. Тем не менее для практических применений недостаточно знать только эту величину. При разработке реальных оптоэлектронных устройств важным параметром является рабочая длина волны. Необходимо также определить оптимальные параметры КЯ для работы в конкретной области длин волн.

Наиболее строгий подход к решению задачи об энергии связи экситона в КЯ изложен в работе [5]. Однако он приводит к большому объему вычислений. Для расчета параметров экситона (энергии связи и спектрального положения экситонного пика поглощения) в широком диапазоне ширины КЯ и концентрации In с достаточной для практики точностью можно использовать метод огибающей волновой функции в приближении эффективной массы. При этом не учитываются следующие эффекты, влияющие на параметры экситона: смешивание состояний легкой и тяжелой дырок, смешивание состояний из разных подзон

размерного квантования, непараболические зоны проводимости, различие диэлектрической проницаемости материалов барьера и ямы.

В наших расчетах используется цилиндрическая система координат (z, ρ, φ) , причем ось z направлена поперек КЯ, а начало координат соответствует центру КЯ. Параметры с индексом 1 относятся к материалу ямы, с индексом 2 — к материалу барьера, с индексом e — к электрону, а с индексом h — к дырке.

Рассмотрим движение электрона и дырки в КЯ с учетом их кулоновского взаимодействия. Гамильтониан для этого случая записывается следующим образом [6]:

$$\hat{H}_{ho} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3 + \hat{H}_4 + \hat{H}_5 + \hat{H}_6, \quad (1)$$

где

$$\hat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\parallel}} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

— кинетическая энергия относительного движения электрона и дырки в плоскости КЯ,

$$\hat{H}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2}, \quad \hat{H}_3 = -\frac{\hbar^2}{2m_{h\perp}} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2}$$

— кинетическая энергия движения электрона и дырки соответственно поперек плоскости КЯ,

$$\hat{H}_4 = -\frac{e^2}{\varepsilon ((z_e - z_h)^2 + \rho^2)^{1/2}}$$

— энергия кулоновского взаимодействия,

$$\hat{H}_5 = V_{ew}(z_e), \quad \hat{H}_6 = V_{hw}(z_h)$$

— потенциалы КЯ для электрона и дырки соответственно. При этом μ_{\parallel} — эффективная масса экситона в плоскости квантовой ямы $\mu_{\parallel}^{-1} = m_e^{-1} + m_{h\perp}^{-1}$, $m_{h\perp}$ — эффективная масса дырки в плоскости КЯ, $m_{h\perp}$ — эффективная масса дырки поперек квантовой ямы.

Так как уравнение с гамильтонианом (1) не имеет аналитического решения, мы будем искать его собственные значения вариационным методом, хорошо известным в квантовой механике [7]. Возьмем пробную функцию в виде $\Psi = f_e(z_e) f_h(z_h) g(z_e - z_h, \rho)$, где $g(z) = \exp(-\sqrt{z^2 + \rho^2}/r)$, f_e, f_h — точные решения для одночастичных гамильтонианов электрона и дырки соответственно, а r — характерный размер экситона. Определение энергии связи экситона E_b сводится к минимизации при варьировании по r функционала

$$E_b(r) = \frac{\langle \Psi | \hat{H}_{ho} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} - E_e - E_h. \quad (2)$$

В работах [3, 4] не детализируются используемые методы вычислений. Прямое применение формулы (2) порождает существенные трудности: кулоновский член в гамильтониане обращается в бесконечность при $z_e = z_h$, что требует применения специальных методов интегрирования, а численное интегрирование по трем координатам приводит к большому объему вычислений. По-видимому, из-за этого в известных работах, как правило, приводится только несколько графиков зависимости E_b от d при постоянном x , и наоборот, поэтому на основе приведенных данных невозможно определить оптимальные параметры КЯ. Для преодоления этой трудности мы провели аналитическое интегрирование по ρ (интегрирование по φ сводится к умножению на 2π , так как гамильтониан не зависит от φ). Интегрирование по ρ дает следующие результаты:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 2\pi \int dz_e dz_h \exp\left(-2 \frac{|z|}{r}\right) f_e^2 f_h^2 \frac{r}{2} \left(|z| + \frac{r}{2}\right), \quad (3)$$

$$E_b \langle \Psi | \Psi \rangle = 2\pi \int dz_e dz_h \left\{ \exp\left(-2 \frac{|z|}{r}\right) \left[f_e^2 f_h^2 \left(\frac{\hbar^2}{8\mu_{\parallel}} + \frac{\hbar^2}{4\mu_{\perp}} - \frac{e^2 r}{2\varepsilon} \right) + \frac{|z|}{r} \left[\frac{\hbar^2}{4\mu_{\parallel}} - \frac{\hbar^2}{2\mu_{\perp}} \right] + z \left[\frac{\hbar^2}{2m_e} f_e^2 f_h \frac{\partial f_e}{\partial z_e} - \frac{\hbar^2}{2m_h} f_e f_h \frac{\partial f_h}{\partial z_h} \right] \right\} -$$

$$-E_1 \left(2 \frac{|z|}{r} \right) \frac{z^2}{r^2} \left[\frac{\hbar^2}{2\mu_u} - \frac{\hbar^2}{2\mu_l} \right] f_{\sigma}^2 f_{\delta}^2 \left. \vphantom{\frac{z^2}{r^2}} \right\}, \quad (4)$$

где $z = z_e - z_h$, $E_1(x) = \int_x^{\infty} \frac{e^{-x}}{x} dx$.

В случае КЯ на основе $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ большую роль играют напряжения, возникающие в структуре. Так как разница в постоянных кристаллической решетки между GaAs и InAs довольно велика ($\approx 7\%$), напряжения оказывают

Параметр	GaAs	InAs
l , Å	5.6533	6.0854
a , эВ	-9.8	-5.8
b , эВ	-1.76	-1.8
C_{11} , дин/см ²	11.88	8.33
C_{12} , дин/см ²	5.32	4.53
ε	12.5	14.6
E_g , эВ	1.452	0.36
m_e/m_0	0.0667	0.023
m_{hh}/m_0	0.34	0.32

Примечание. m_0 — масса электрона.

существенное влияние на структуру валентной зоны даже при малых x . Обычно подобные структуры выращивают на подложке из GaAs, поэтому все напряжения концентрируются в слое $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, а область барьера остается ненапря-

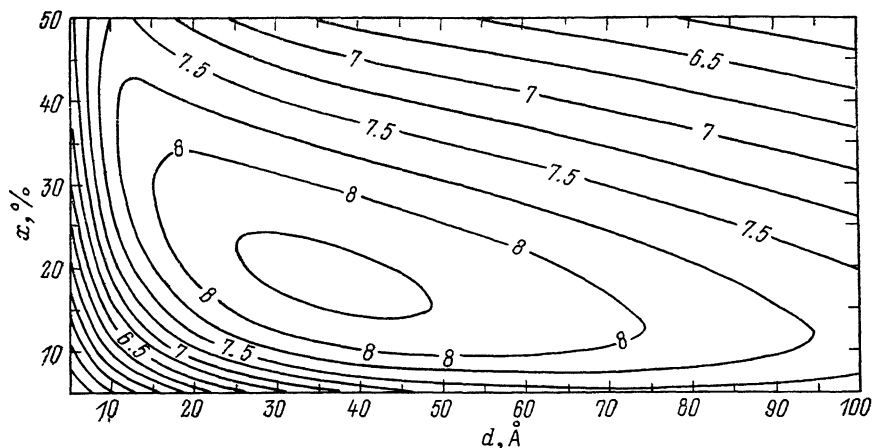


Рис. 1. Зависимость энергии связи экситона от параметров КЯ.

женной. В работе [8] показано, что в этом случае происходит сдвиг края валентной зоны вниз, причем этот сдвиг существенно различен для легких и тяжелых дырок. Относительная деформация слоя дается формулой $\varepsilon = (l_2 - l_1)/l_1$, где l — размер элементарной ячейки соответствующего материала (в нашем случае $\varepsilon < 0$). Сдвиг зон определяется совместным действием деформаций всестороннего сжатия и сдвига. Он определяется формулами

$$\delta E_{hh} = \delta E_h - \delta E_s, \quad \delta E_{lh} = \delta E_h + \delta E_s, \quad (5)$$

для тяжелых и легких дырок соответственно, где

$$\delta E_h = -\varepsilon 2a (C_{11} - C_{12})/C_{11}, \quad \delta E_s = -\varepsilon b (C_{11} + 2C_{12})/C_{11}, \quad (6)$$

δE_h — сдвиг, обусловленный деформацией всестороннего сжатия, δE_s — деформацией сдвига, а и b — потенциальные коэффициенты для этих деформаций, а C_{ij} — элементы тензора упругости материала.

Значения параметров, использованные в расчетах, приведены в таблице. Для определения большинства из них при $0 < x < 1$ можно использовать линейную интерполяцию [9], а для E_g при $T=300$ К следующее выражение:

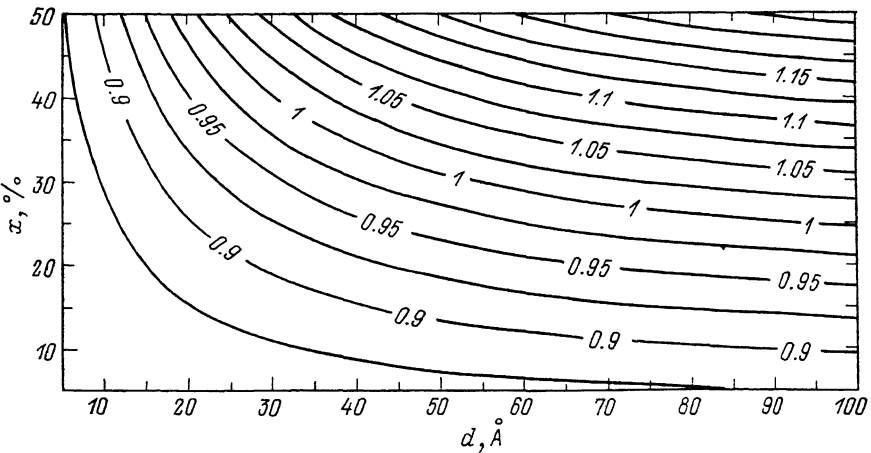


Рис. 2. Зависимость длины волны, соответствующей экситонному пику, от параметров КЯ.

$E_g(x) = 1.452 - 1.53x - 0.45x^2$ [10]. Масса $m_{\text{эл}}$ была принята равной $0.21m_0$ [4]. Важным параметром является также $Q_v = \Delta E_v / \Delta E_g$, т. е. доля разрыва ширины

запрещенной зоны, которая в структуре $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ приходится на разрыв в валентной зоне. В работе [8] для этой величины приводится значение 0.48. Для вычисления значений функции $E_1(x)$ использовался алгоритм, описанный в [11].

Расчеты показывают, что для легких дырок сдвиг края валентной зоны превышает величину $Q_v \Delta E_g$. Это приводит к исчезновению для легких дырок удерживающего потенциала КЯ. По этой причине все результаты приводятся только для экситона, образованного с участием тяжелой дырки. При расчетах использовалась формула (4). Далее проводился поиск минимума функции $E_b(r)$. Все расчеты проводились на IBM AT — совместимом ПК. Время определения параметров экситона для конкретных значений d и x составляло ~ 1 мин.

Результаты расчетов представлены на рис. 1—3. На рис. 1 показаны линии

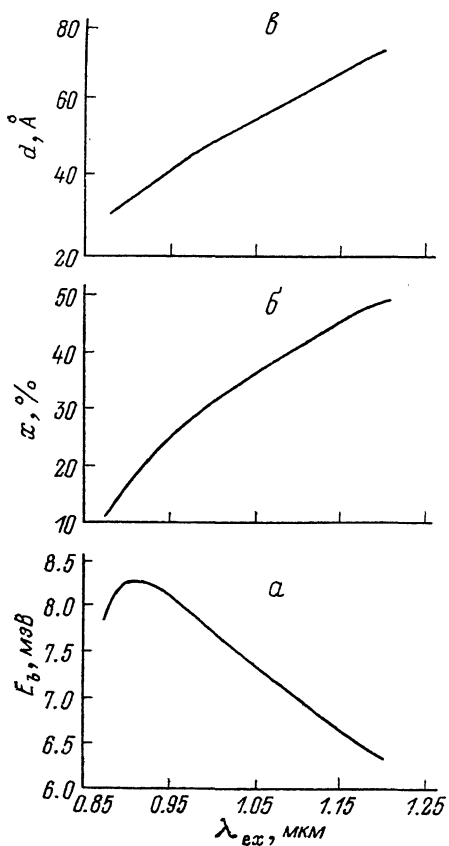


Рис. 3. Зависимости максимально достижимой энергии связи экситона (а), оптимальной концентрации In в КЯ (б) и оптимальной ширины КЯ от длины волны, соответствующей экситонному пику (в).

уровня функции $E_b(x, d)$, а на рис. 2 — $\lambda_{\text{ex}}(x, d)$, (где λ_{ex} — длина волны, соответствующая экситонному пику). Из рис. 1 видно, что оптимальной с точки зрения увеличения энергии связи экситона является область $x=0.2$, $d=40$ Å (при этом $E_b=8.3$ мэВ), однако λ_{ex} для таких параметров равна $0.9-0.925$ мкм.

Энергия связи экситона составляет в объемном GaAs 4.2 мэВ, в $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ — 2.6 мэВ и изменяется практически линейно с концентрацией In. Понижение энергии связи экситона при увеличении доли In в КЯ связано с малым значением эффективной массы в InAs. Для широких ям экситон практически полностью локализован в материале ямы, следовательно, эффективная масса экситона уменьшается, что приводит к уменьшению его энергии связи. По рис. 1 и 2 можно определить для каждой длины волны оптимальные параметры КЯ. На рис. 3 приведены эти зависимости. Расчеты проводились только в диапазоне $0 < x < 0.5$, так как при больших значениях x удается вырастить без дислокаций лишь несколько монослоев. На рис. 3, в видно, что с увеличением λ_{ex} максимально достижимая энергия связи экситона падает. Тем не менее, как показывают проведенные расчеты, на основе $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ можно создавать структуры с КЯ, обеспечивающие $E_b > 7$ мэВ для диапазона длин волн λ_{ex} по крайней мере до 1.1 мкм.

Список литературы

- [1] Херман М. Полупроводниковые сверхрешетки. М., 1989. 240 с.
- [2] Miller D. A. B., Weiner J. S., Chemla D. S. // IEEE J. Quant. Electron. 1986. V. QE-22. N 9. P. 1816—1830.
- [3] Hou H. Q., Segawa Y., Aoyagi Y., Namba S. // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. N 2. P. 1284—1289.
- [4] Moore K. J., Duggan G., Woodbridge K., Roberts C. // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. N 2. P. 1090—1094.
- [5] Andreami L. C., Pasquarello A. // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. N 14. P. 8928—8938.
- [6] Greene R. J., Bajaj K. K. // Sol. St. Commun. 1983. V. 45. N 9. P. 831—835.
- [7] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М., 1989. 768 с.
- [8] Asai H., Oe K. // J. Appl. Phys. 1983. V. 54. N 4. P. 2052—2056.
- [9] Adachi S. // J. Appl. Phys. 1982. V. 53. N 12. P. 8775—8792.
- [10] Pan S. H., Shen H., Hang Z., Pollak F. H., Zhuang W., Xu Q., Roth A. P., Masut R. A., Lacle C., Morris D. // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. N 5. P. 3375—3382.
- [11] Абрамовиц М., Стеган И. Справочник по специальным функциям. М., 1979. 832 с.

Институт общей физики АН СССР
Москва

Получена 20.03.1991

Принята к печати 19.06.1991