

Примесное поглощение света в структурах с квантовыми точками

© В.Д. Кревчик, Р.В. Зайцев

Пензенский государственный университет,
440017 Пенза, Россия

E-mail: physics@diamond.stup.ac.ru (for V.D. Krevchik)

(Поступила в Редакцию 7 апреля 2000 г.
В окончательной редакции 27 июля 2000 г.)

В рамках модели потенциала нулевого радиуса в приближении эффективной массы рассмотрено примесное поглощение света в квантовой точке с параболическим потенциальным профилем. Выявлена чувствительность эффекта позиционного беспорядка к фактору размерности при переходе от квантовой ямы к квантовой точке. Исследована спектральная зависимость коэффициента примесного поглощения света с учетом дисперсии размеров квантовых точек. Показано, что учет дисперсии приводит к размытию дискретных линий в коэффициенте поглощения. При этом край полосы примесного поглощения зависит от параметров квантовой точки и глубины залегания примесного уровня.

1. Исследование оптических свойств полупроводниковых квантовых точек (КТ), синтезированных в стеклянной матрице, весьма актуально для разработки новых приборов квантовой электроники [1]. Важным аспектом этих исследований является надежная идентификация оптических переходов, основанная на расчетах соответствующих сил осцилляторов. Так, в случае межзонного поглощения света сферически-симметричной КТ такая идентификация [2] позволяет интерпретировать результаты эксперимента [3]. Развитие технологии δ -легирования (обзор дан в [4]) стимулирует исследования примесного поглощения света в структурах с КТ. В настоящей работе исследуются локальные электронные состояния, наведенные дефектами внутри полупроводниковых КТ, синтезированных в прозрачной боросиликатной матрице. КТ описывается в рамках модели осцилляторной сферической ямы. Для потенциала дефекта используется модель потенциала нулевого радиуса [5–7]. Эта модель, как известно [7], достаточно хорошо описывает D^- состояния и состояния отрицательного иона водорода. В приближении эффективной массы проводится расчет коэффициента примесного поглощения света с учетом дисперсии размеров КТ. При этом предполагается, что дисперсия возникает в процессе фазового распада пересыщенного твердого раствора [8,9] и удовлетворительно описывается формулой Лифшица–Слезова [10]

$$P(u = R_0/\bar{R}_0) = \begin{cases} \frac{3eu^2 \exp[-1/(1-2u/3)]}{2^{5/3}(3+u)^{7/3}(3/2-u)^{11/3}}, & u < 3/2, \\ 0, & u > 3/2, \end{cases} \quad (1)$$

где e — основание натурального логарифма, R_0 и \bar{R}_0 — радиус КТ и его среднее значение соответственно.

2. Уравнение Липпмана–Швингера для связанного состояния запишется в виде¹

$$\Psi_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{R}_a) = \int d\mathbf{r}_1 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1; E_\lambda) V_\delta(\mathbf{r}, \mathbf{R}_a) \Psi_\lambda(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_a), \quad (2)$$

где $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1; E_\lambda)$ — одноэлектронная функция Грина, соответствующая источнику в точке $\mathbf{R}_a = (x_a, y_a, z_a)$ и энергии E_λ , $\Psi_\lambda(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_a)$ — волновая функция электрона, локализованного на короткодействующем потенциале, $E_\lambda = -\hbar^2 \lambda^2 / (2m^*)$ — энергия связи примесного центра, m^* — эффективная масса электрона. Здесь $V_\delta(\mathbf{r}, \mathbf{R}_a)$ — потенциал нулевого радиуса мощностью $\gamma = 2\pi/\alpha$

$$V_\delta(\mathbf{r}, \mathbf{R}_a) = \gamma \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_a) [1 + (\mathbf{r} - \mathbf{R}_a) \nabla_{\mathbf{r}}]. \quad (3)$$

Параметр α определяется энергией связи E_i электронного локализованного состояния на этом же дефекте в массивном полупроводнике. После подстановки (3) в (2) будем иметь

$$\Psi_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{R}_a) = \gamma G(\mathbf{r}, \mathbf{R}_a; E_\lambda) (\hat{T} \Psi_\lambda)(\mathbf{R}_a, \mathbf{R}_a), \quad (4)$$

здесь

$$(\hat{T} \Psi_\lambda)(\mathbf{R}_a, \mathbf{R}_a) \equiv \lim_{\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{R}_a} [1 + (\mathbf{r} - \mathbf{R}_a) \nabla_{\mathbf{r}}] \Psi_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{R}_a). \quad (5)$$

Действуя оператором \hat{T} на обе части соотношения (4) и выполняя суммирование по квантовым числам с использованием формулы Меллера для производящей функции [11]

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{u}{2}\right)^n \frac{H_n(x_1) H_n(x_2)}{n!} = \frac{1}{\sqrt{1-u^2}} \times \exp\left\{\frac{2x_1 x_2 u - (x_1^2 + x_2^2) u^2}{1-u^2}\right\}, \quad (6)$$

¹ Примесный центр расположен в точке $\mathbf{R}_a = (x_a, y_a, z_a)$, а отсчет энергии ведется от дна осцилляторной сферической ямы, которой аппроксимируется КТ.

получим уравнение, определяющее зависимость энергии связанного состояния E_λ примесного центра от параметров КТ и положения дефекта R_a ,

$$\begin{aligned} \sqrt{\eta^2 + \frac{3}{2}\beta^{-1}} = \eta_i - \sqrt{\frac{2}{\beta\pi}} \int_0^\infty dt \exp[-(\beta\eta^2 + 3/2)t] \\ \times \left[\frac{1}{2t\sqrt{2t}} - \frac{1}{(1 - \exp(-2t))^{3/2}} \right] \\ \times \exp\left(-\frac{R_a^{*2}\beta^{-1}}{2} \frac{1 - \exp(-t)}{1 + \exp(-t)}\right), \quad (7) \end{aligned}$$

где $\eta^2 = |E_\lambda|/E_d$, $\eta_i^2 = |E_i|/E_d$ — параметры, характеризующие энергию связанного состояния примесного центра в КТ и в массивном полупроводнике соответственно, $E_d = m^*e^4/2\hbar^2\varepsilon^2$ — эффективная боровская энергия с учетом эффективной массы m^* и диэлектрической проницаемости ε , $\beta = R_0^*/4\sqrt{U_0^*}$, $R_0^* = 2R_0/a_d$, $a_d = \varepsilon\hbar^2/m^*e^2$ — эффективный боровский радиус, $U_0^* = U_0/E_d$ — амплитуда потенциала КТ, $R_a^* = R_a/a_d$.

Результаты численного анализа уравнения (7) приведены на рис. 1. Из рисунка видно, что в КТ с примесными центрами имеет место эффект позиционного беспорядка: $\eta^2(R_a^*)$ является убывающей функцией R_a (кривая 1). Такое поведение $\eta^2(R_a^*)$ характерно и для размерно-квантованных пленок [5,6] и квантовых ям [7]. Оно обусловлено кардинальной модификацией локальных электронных состояний вблизи границ системы. С ростом амплитуды потенциала КТ U_0^* условия существования связанного состояния становятся более жесткими (ср. кривые 1 и 2). Для сравнения на этом же рисунке кривой 3 представлены результаты численного расчета зависимости энергии локализации от положения такого же дефекта в квантовой яме с параболическим потенциальным профилем, полученной в [12]. В принятых здесь обозначениях соответствующее уравнение имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \sqrt{\eta^2 + \frac{1}{2}\beta^{-1}} = \eta_i - \sqrt{\frac{1}{2\beta\pi}} \int_0^\infty \frac{dt}{t} \exp[-(\beta\eta^2 + 1/2)t] \\ \times \left[\frac{1}{\sqrt{2t}} - \frac{1}{(1 - \exp(-2t))^{1/2}} \right] \\ \times \exp\left(-\frac{a^{*2}\beta^{-1}}{2} \frac{1 - \exp(-t)}{1 + \exp(-t)}\right), \quad (8) \end{aligned}$$

здесь $a^* = z_a/a_d$, $\beta = L^*/4\sqrt{U_0^*}$, $L^* = L/a_d$, L — ширина квантовой ямы.

Сравнение кривых 1 и 3 показывает, что переход $2D \rightarrow 0D$ сопровождается усилением эффекта позиционного беспорядка.

3. Рассмотрим примесное поглощение света в КТ с параболическим потенциальным профилем. Волновая

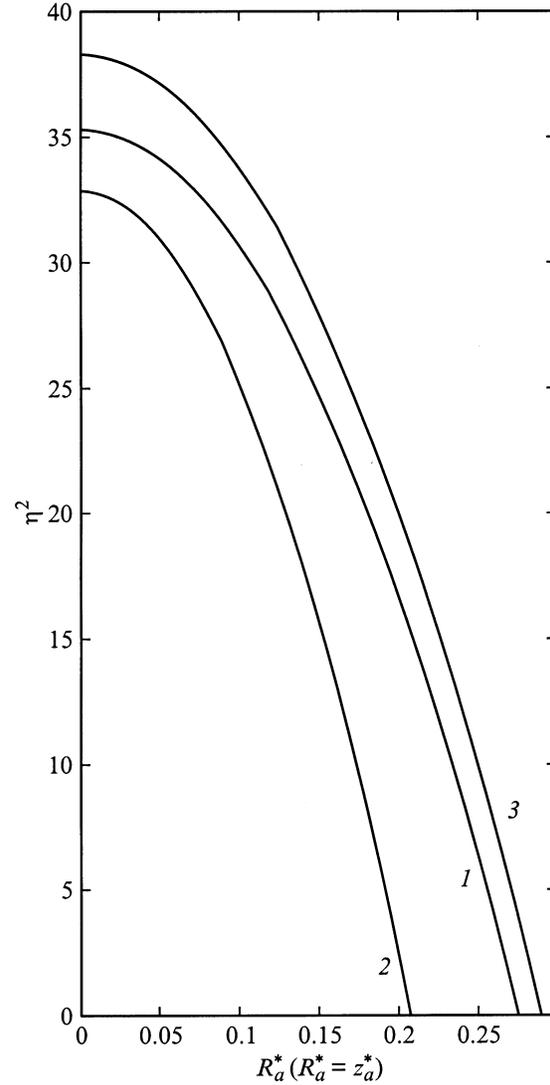


Рис. 1. Зависимости положения локализованного уровня $\eta^2 = |E_\lambda|/E_d$ от координаты примесного центра $R_a^* = R_a/a_d$ при различных параметрах квантовой точки: 1 — $U_0^* = 120$, $\eta_i^2 = 40$, $R_0^* = 1$; 2 — $U_0^* = 200$, $\eta_i^2 = 40$, $R_0^* = 1$. Аналогичная зависимость для квантовой ямы представлена кривой 3: $U_0^* = 120$, $\eta_i^2 = 40$, $L^* = 1$.

функция электрона, локализованного на короткодействующем потенциале, как нетрудно видеть из (4), только множителем отличается от одноэлектронной функции Грина

$$\begin{aligned} \Psi_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{R}_a) = C \exp\left(-\frac{r^2 + R_a^2}{2a^2}\right) \int_0^\infty dt e^{-\beta t} (1 - e^{-2t})^{-3/2} \\ \times \exp\left\{-\frac{e^{-2t}(r^2 + R_a^2) - 2e^{-t}(\mathbf{r}, \mathbf{R}_a)}{a^2(1 - e^{-2t})}\right\}, \quad (9) \end{aligned}$$

где $C = (-\partial/\partial\varepsilon_a G(R_a, R_a; \varepsilon_a) a^3)^{1/2}$ — нормирующий множитель, $\varepsilon_a = |E_\lambda|/\hbar\omega_0$, $E_0 = 3/2\hbar\omega_0$ — энергия основного состояния КТ, $a^2 = \hbar/(m^*\omega_0)$.

Рассмотрим случай, когда примесный атом располагается в центре КТ ($R_a = 0$). Тогда используя интегральное представление для функции Уиттекера [11], соотношение (9) можно переписать как

$$\Psi_\lambda(r) = C \left(\frac{r^2}{a^2}\right)^{-3/4} \Gamma\left(\frac{\varepsilon_a + 3/2}{2}\right) W_{-\varepsilon_a/2, 1/4}\left(\frac{r^2}{a^2}\right), \quad (10)$$

здесь $\Gamma(x)$ — гамма-функция, $W_{\kappa, \mu}(x)$ — функция Уиттекера,

$$C = \left\{ 2\sqrt{\pi} \Gamma(\varepsilon_a/2 + 7/4) \cdot a^3 \left[(\varepsilon_a/2 + 3/4) (\Psi(\varepsilon_a/2 + 7/4) - \Psi(\varepsilon_a/2 + 1/4)) - 1 \right] / \left[(\varepsilon_a + 3/2)^2 \Gamma(\varepsilon_a/2 + 1/4) \right] \right\}^{-1/2},$$

$\Psi(x)$ — логарифмическая производная гамма-функции.

Волновая функция конечного состояния берется в виде

$$\Psi_{fn, l, m}(r) = C_{nl} \left(\frac{r}{a}\right)^l \exp\left(-\frac{r^2}{2a^2}\right) \frac{\Gamma(l + 3/2)}{\Gamma(l + 3/2 + n)} L_n^{l+1/2} \left(\frac{r^2}{a^2}\right) \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\cos\theta) \exp(im\varphi), \quad (11)$$

здесь $C_{nl} = \sqrt{2n! \Gamma(l + n + 3/2) / a^3} / \Gamma(l + 3/2)$ — множитель нормировки, $L_n^{l+1/2}(r^2/a^2)$ — обобщенные полиномы Лагерра, $P_l^m(\cos\theta)$ — присоединенные функции Лежандра первого рода, n, l и m — радиальное, орбитальное и магнитное квантовые числа соответственно, r, φ, θ — сферические координаты. Такой выбор волновой функции конечного состояния оправдан, если выполнено неравенство $\lambda a \gg 1$ (случай сильной локализации примесного электрона).

В силу сферической симметрии рассматриваемой задачи для оптических переходов в дипольном приближении действует обычное правило отбора: переходы из основного s -состояния примесного центра идут в возбужденные p -состояния КТ. Квадрат модуля матричного элемента, определяющий величину силы осциллятора дипольного оптического перехода, имеет вид

$$|M_{f\lambda}|^2 = \frac{\pi^{5/2} \alpha^* I_0 \lambda_0^2}{6^3 \omega} a^2 E_0^2 (\varepsilon_a + 2n + 5/2)^2 \times \frac{n! (\varepsilon_a + 3/2)^2 \Gamma(\varepsilon_a/2 + 1/4) \Gamma^2(\varepsilon_a/2 + 3/4)}{\Gamma(n + 5/2) \Gamma(\varepsilon_a/2 + 7/4) \{(\varepsilon_a/2 + 3/4) \times [\Psi(\varepsilon_a/2 + 7/4) - \Psi(\varepsilon_a/2 + 1/4)] - 1\}} \times \left\{ \sum_{m=0}^n (-1)^m \frac{\Gamma(n + 5/2)}{(n-m)! \Gamma(m + 5/2) m!} \frac{(2m+3)!!}{2^m} \times \frac{\Gamma(m+2)}{\Gamma(m+2 + \varepsilon_a/2 + 3/4)} \right\}^2, \quad (12)$$

где a^* — постоянная тонкой структуры с учетом диэлектрической проницаемости, ω — частота света, I_0 — его интенсивность, λ_0 — коэффициент локального поля.

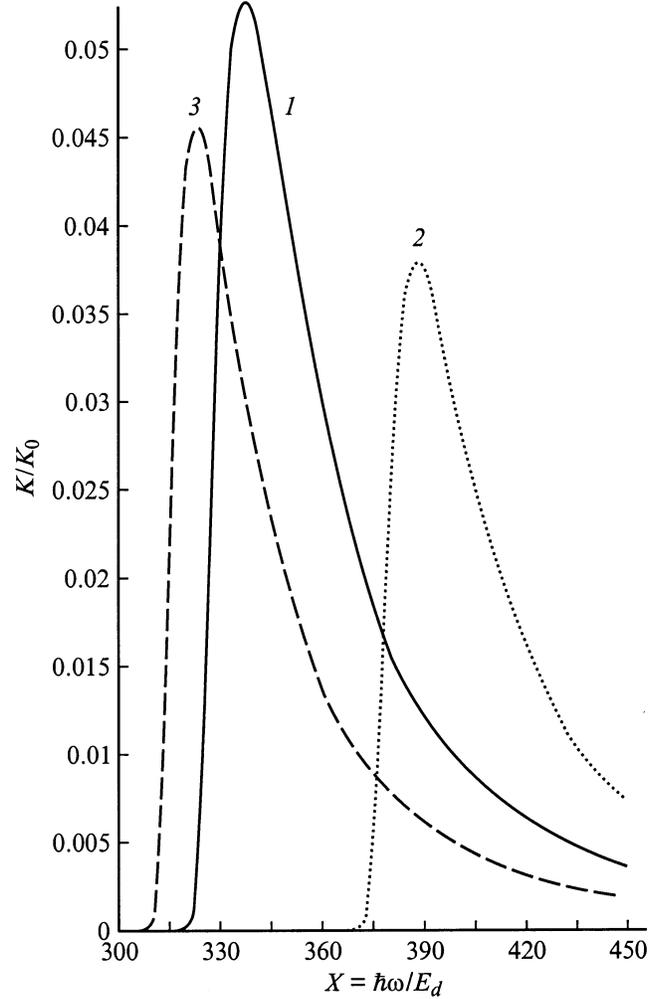


Рис. 2. Спектральная зависимость нормированного коэффициента поглощения K/K_0 для оптического перехода с максимальной силой осциллятора ($n = 0$) при различных параметрах КТ: 1 — $U_0^* = 100$, $\eta_i^2 = 250$, $\bar{R}_0^* = 1.0$; 2 — $U_0^* = 100$, $\eta_i^2 = 300$, $\bar{R}_0^* = 1.0$; 3 — $U_0^* = 100$, $\eta_i^2 = 250$, $\bar{R}_0^* = 1.2$.

С учетом дисперсии размеров КТ выражение для коэффициента примесного поглощения света K можно представить в виде

$$K = K_0 \frac{X}{(X - \eta^2)^3 \beta^*} \sum_{n=0}^N P(\delta_n) (2n + 5/2)^2 \times \frac{n! (2\Delta_n + 3/2)^2 \Gamma(\Delta_n + 1/4) \Gamma^2(\Delta_n + 3/4)}{\Gamma(n + 5/2) \Gamma(\Delta_n + 7/4) \{(\Delta_n + 3/4) \times [\Psi(\Delta_n + 7/4) - \Psi(\Delta_n + 1/4)] - 1\}} \times \left\{ \sum_{m=0}^n (-1)^m \frac{\Gamma(n + 5/2)}{(n-m)! \Gamma(m + 5/2) m!} \frac{(2m+3)!!}{2^m} \times \frac{\Gamma(m+2)}{\Gamma(m+2 + \Delta_n + 3/4)} \right\}^2, \quad (13)$$

здесь $K_0 = \pi^{7/2} \alpha^* \lambda_0^2 a_d^2 N_0 / 24$, $\beta^* = \bar{R}_0^* / 4 \sqrt{U_0^*}$, $\bar{R}_0^* = 2\bar{R}_0 / a_d$, $\delta_n = (2n + 5/2) / [X - \eta^2] \beta^*$, $X = \hbar\omega E_d$,

$N = [C]$ — целая часть числа $C = [3(X - \eta^2)\beta^*/2 - 5/2]/2$, $\Delta_n = \eta^2(2n + 5/2)/[2(X - \eta^2)]$, функция $P(\delta_n)$ определяется формулой (1), N_0 — концентрация КТ в диэлектрической матрице.

На рис. 2 приведена спектральная зависимость нормированного коэффициента примесного поглощения K/K_0 для оптического перехода с максимальной силой осциллятора ($n = 0$). Можно видеть, что учет дисперсии приводит к размытию дискретных линий в коэффициенте примесного поглощения света. Эволюция спектра примесного поглощения с изменением размера КТ \bar{R}_0^* показана кривыми 2 и 3. С уменьшением \bar{R}_0^* край полосы примесного поглощения сдвигается в коротковолновую область спектра, что отражает смещение нижнего уровня размерного квантования. Чувствительность края полосы примесного поглощения к параметру $\eta^2 = |E_\lambda|/E_d$ показана кривыми 1 и 2. С уменьшением η^2 (радиус локализованного состояния увеличивается) сила осциллятора дипольного оптического перехода заметно возрастает (ср. кривые 1 и 2), а край полосы примесного поглощения сдвигается в длинноволновую область спектра. Этот сдвиг происходит по закону ($N = 0$): $X_t = \eta^2 + 5/(3\beta^*)$. С точки зрения эксперимента, последний может быть использован для определения среднего радиуса нанокристаллов (КТ), если известны параметры η^2 и U_0^* .

4. Таким образом, проведено рассмотрение локализованного состояния на короткодействующем потенциале в КТ с параболическим потенциальным профилем. В рассмотренной выше модели КТ амплитуда ее потенциала U_0^* является эмпирическим параметром.

В рамках указанного приближения продемонстрировано влияние фактора размерности при переходе $2D \rightarrow 0D$ на положение примесного уровня. Учет дисперсии размеров КТ существенно меняет характер спектральной зависимости коэффициента примесного поглощения света. Квантовая точка, заполненная только электронами, локализованными на короткодействующих потенциалах, может иметь более высокий порог тепловой ионизации. Это связано с тем, что электроны, локализованные на короткодействующих потенциалах внутри КТ, оказываются запертыми между барьерами высотой порядка U_0^* и $U_0^* + \eta^2$. В этой связи использование массива КТ с примесными состояниями в качестве активной области лазерной структуры вызывает определенный интерес.

Авторы признательны А.Э. Юновичу и А.А. Гуткину за интерес к работе.

Список литературы

- [1] J. Yumoto, S. Fukushima, K. Kubodera. Opt. Lett. **12**, 832 (1987).
- [2] Ал.Л. Эфрос, А.Л. Эфрос. ФТП **16**, 1209 (1982).
- [3] А.И. Екимов, А.А. Онущенко. ФТП **16**, 1215 (1982).
- [4] А.Я. Шик. ФТП **26**, 1161 (1992).
- [5] V.S. Krevchik, E.Z. Imamov. Phys. Stat. Sol. (b), **114** (1982).

- [6] В.Д. Кревчик, Э.З. Имамов. ФТП **17**, 1235 (1983).
- [7] А.А. Пахомов, К.В. Халипов, И.Н. Яссиевич. ФТП **30**, 1387 (1996).
- [8] N.F. Borelli, D.W. Hall, H.J. Holland, D.W. Smith. J. Appl. Phys. **61**, 12, 5399 (1987).
- [9] Н.Р. Кулиш, В.П. Кунец, М.П. Лисица. ФТТ, **39**, 1865 (1997).
- [10] И.М. Лифшиц, В.В. Слезов. ЖЭТФ **35**, 1(8), 479 (1958).
- [11] Г. Бейтмен, А. Эрдейи. Высшие трансцендентные функции. Том 2. Наука, М. (1974).
- [12] В.Д. Кревчик, Р.В. Зайцев. В сб. докладов "Проблемы и прикладные вопросы физики". Саранск (1999).