

Излучение света полупроводниковой структурой с квантовой ямой и массивом квантовых точек

© В.П. Евтихийев, О.В. Константинов, А.В. Матвеевцев, А.Е. Романов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 17 июля 2000 г. Принята к печати 17 мая 2001 г.)

Изучен новый тип комбинированной активной области лазера, которая содержит квантовую яму состава $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ и массив квантовых точек из InAs в окружении GaAs . Квантовая яма является накопителем инжектированных носителей, а массив квантовых точек — излучающей системой, расположенной в туннельной близости от квантовой ямы. Построена теория, позволяющая находить уровни энергии электронов и дырок в квантовой точке. Рассмотрены вопросы заполнения квантовых точек за счет резонансного туннелирования электронов и дырок из квантовой ямы в квантовую точку; выводы сопоставляются с результатами исследований экспериментального лазера с комбинированной активной областью.

1. Введение

В литературе были неоднократно описаны лазеры на массивах квантовых точек. В частности, известны лазеры на квантовых точках арсенида индия в обкладках арсенида галлия [1], излучающие в области энергий фотонов 1.2–1.3 эВ. Их отличительная особенность заключается в относительно низких значениях порогового тока, $\sim 200 \text{ А/см}^2$ при комнатной температуре. Эти лазеры содержат один или несколько слоев квантовых точек в нелегированной части p – n -структуры. Предварительные экспериментальные исследования показали, что возникают определенные преимущества, если в туннельной близости от массива квантовых точек расположить квантовую яму; квантовый выход излучения в такой структуре почти не зависит от тока возбуждения. Очевидным преимуществом рассматриваемой структуры является потенциальная возможность интенсификации процесса захвата носителей, поскольку сечение захвата в квантовую яму существенно превосходит сечение захвата на квантовые точки. Кроме того, тепловое равновесие внутри квантовой ямы также должно устанавливаться быстрее, чем в массиве квантовых точек.

Предлагаемая работа посвящена построению теоретического подхода, позволяющего находить уровни энергии электронов и дырок в квантовой точке. Цель работы — установить условие совпадения энергий ионизации квантовых состояний электронов и дырок квантовой ямы и квантовых точек. Благодаря резонансу существенно облегчается туннелирование из квантовой ямы в квантовые точки и ускоряется заполнение последних.

Рассматривается полупроводниковая лазерная p – n -гетероструктура, которая содержит квантовую яму — слой твердого раствора $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ толщиной W и массив квантовых точек InAs , расположенный в материале GaAs на туннельно-близком расстоянии от квантовой ямы. Эксперимент показал, что такое расстояние должно быть $\sim 40 \text{ \AA}$. Как отмечалось выше, квантовая яма играет роль резервуара, накапливающего электроны и дырки при прохождении прямого тока. Когда расстояние между

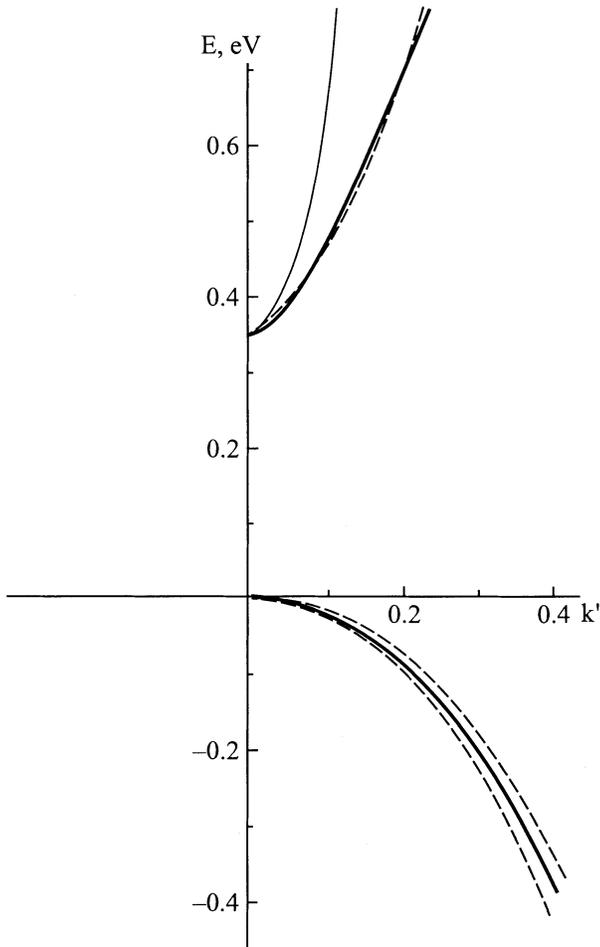
квантовой ямой и слоем квантовых точек мало, носители могут легко туннелировать из ямы в квантовые точки при условии резонансности уровней в точке и яме. Как будет показано далее, квантовая яма толщиной $W = 80 \text{ \AA}$ и состава $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ будет иметь энергию ионизации основного уровня дырок, примерно равную энергии ионизации дырки из незаполненной квантовой точки. Уровень энергии электронов в незаполненной квантовой точке на 0.03 эВ выше, чем в квантовой яме. Однако при заполнении квантовой точки дыркой электронный уровень в ней понижается на величину того же порядка за счет кулоновского взаимодействия электрона с дыркой. При этом снова возникает возможность беспрепятственного резонансного туннелирования электрона из квантовой ямы в квантовую точку, заполненную дыркой. Электрон и дырка в квантовой точке образуют связанный экситон, причем свет излучают только синглетные экситоны. Триплетные экситоны, с параллельными спинами электронов и дырок, рекомбинируют безызлучательно, за счет оже-эффекта. По этой причине квантовый выход (при относительно небольших значениях тока) будет не более 25%, что соответствует наблюдениям.

2. Законы дисперсии носителей

Энергетический спектр тяжелых дырок в кристалле InAs в сравнительно широких пределах достаточно хорошо описывается квадратичным приближением. Согласно данным, приведенным в [2,3], это выполняется при энергии дырок $< 0.4 \text{ эВ}$. В упомянутых работах законы дисперсии рассчитаны методом нелокального псевдопотенциала, что дает наиболее достоверные результаты. Исходя из них мы считаем, что энергия дырки дается квадратичным законом дисперсии

$$E_v(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v}, \quad (1)$$

где k — волновой вектор дырки, $m_v = 0.41m_0$ — табличное значение эффективной массы дырки в кристалле InAs . В работе [3] и на рисунке энергия дается



Законы дисперсии $E(k)$ в валентной зоне (нижняя часть рисунка) и в зоне проводимости (верхняя часть). Штриховые кривые — законы дисперсии носителей, полученные методом псевдопотенциала в работе [3]. Толстые сплошные кривые — законы дисперсии, для которых в настоящей работе предложены аппроксимирующие выражения: формула (1) — для дырок и формула (2) — для электронов. В верхней части тонкой сплошной кривой изображен квадратичный закон дисперсии.

в эВ, а волновой вектор в долях предельного значения в направлении $[001]$, $k' = ka/2\pi$, где $a = 6.06 \text{ \AA}$ — постоянная кристаллической решетки InAs. Насколько хорошо выполняется соотношение (1), можно судить по кривым, приведенным в нижней части рисунка. Здесь изображены результаты зонных расчетов [3] для направлений вдоль осей $[100]$ (нижняя штриховая кривая) и $[111]$ (верхняя штриховая кривая). Сплошная линия — это стандартный квадратичный закон дисперсии с табличным значением эффективной массы, даваемый формулой (1). Видно, что эта кривая соответствует среднему положению между штриховыми кривыми, расхождение между которыми обусловлено гофрировкой изоэнергетических поверхностей тяжелых дырок.

Квадратичное приближение для энергетического спектра электронов справедливо лишь внутри очень узкого интервала энергий. Мы нашли, что полуэмпирические

формулы, схожие с формулами Кейна [4], дают достаточно хорошее аналитическое описание численных результатов, полученных в работе [3]. Эта аппроксимация для энергии электрона в зоне проводимости имеет вид

$$E_c(k) = \frac{E_g}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{2\hbar^2 k^2}{m_c E_g}} - 1 \right), \quad (2)$$

где $E_g = 0.356 \text{ эВ}$ — ширина запрещенной зоны InAs, m_c — эффективная масса электрона, которая рассматривается как подгоночный параметр, и полученное значение составляет $m_c = 0.057m_0$. Такое значение массы дает в результате расчета по формуле (2) зависимость, изображенную в верхней части рисунка сплошной толстой кривой; с ней практически совпадает штриховая кривая, изображающая результаты зонных расчетов работы [3]. Кроме того, для зоны проводимости на рисунке построена сплошная тонкая кривая, которая описывает стандартное квадратичное приближение с табличным значением эффективной массы электронов $m_c = 0.027m_0$. Можно видеть, что это приближение действительно приводит к значительной погрешности при энергии электронов, превышающей 0.05 эВ . Заметим, что согласно расчетам [3] электронный энергетический спектр будет изотропным, вплоть до энергии $E_c \approx 1 \text{ эВ}$, когда становится существенной анизотропия, обусловленная различием L - и X -долин.

3. Сферическая модель квантовой точки

Формула (2) для непараболического закона дисперсии относится к случаю плоских волн в безграничной среде. Квантовые точки InAs в окружении GaAs имеют форму усеченных конусов со скругленной вершиной диаметром 15 \AA . Нижнее основание конуса эллиптически, с осями 150 и 170 \AA , высота конуса составляет 20 \AA . Для микрообъекта с такой сложной формой отсутствует непараболический гамильтониан эффективной массы; такой гамильтониан можно построить только для сферического микрообъекта. В работе [5] оптимальный диаметр сферы, моделирующей конус, выбирается так, что он лежит между диаметром сферы, вписанной в остроконечный конус и диаметром сферы, проходящей через вершину конуса и касающейся его основания. По форме конус похож на метательный диск, поэтому диаметры двух упомянутых сфер различаются очень немного. В настоящей работе мы примем, что оптимальный диаметр равен высоте не усеченного конуса, т.е. диаметру сферы, проходящей через вершину и касающейся основания остроконечного конуса, $d = 22.2 \text{ \AA}$. Заметим, что энергетические уровни электронов в сферической квантовой точке будут расположены выше, чем в конусе.

Внутри сферы, на расстояниях $r < d/2$, волновое уравнение как для электронов, так и для дырок имеет следующий вид:

$$T\Psi_1 = E\Psi_1. \quad (3)$$

Энергия отсчитывается от дна соответствующей зоны в кристалле InAs. Здесь T — оператор кинетической энергии, который для электронов получается из формулы (2), а для дырок из формулы (1) путем замены волнового вектора k на оператор $(-i\nabla)$. Рассмотрим радикал от операторного выражения, получающегося для электронов из (2). Мы понимаем оператор-радикал как степенной ряд, возникающий из разложения радикала (2) по степеням k^2 с последующей заменой величины k^2 на оператор $(-\nabla^2)$:

$$T\Psi_1 = -\frac{E_g}{4}(y\nabla^2 + \frac{1}{4}y^2\nabla^4 + \frac{1.3}{4.6}y^3\nabla^6 + \dots)\Psi_1, \\ y = \frac{2\hbar^2}{m_c E_g}. \quad (4)$$

Вне сферы, $r > d/2$, (в кристалле GaAs) волновая функция связанного носителя Ψ_2 будет описываться уравнением, соответствующим параболическому приближению для кинетической энергии,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla^2 + U\right)\Psi_2 = E\Psi_2, \quad U = \Delta E. \quad (5)$$

Здесь m_2 — эффективная масса носителя в кристалле GaAs; потенциальная энергия U равна разрыву ΔE зоны проводимости в случае электронов или валентной зоны в случае дырок.

Рассмотрим далее граничные условия при $r = d/2$. На их обсуждении мы подробнее остановимся ниже. Здесь лишь отметим, что граничные условия являются по существу независимой частью математической модели квантовой точки. Для описания связанных состояний мы выбираем их в виде

$$\Psi_1 = \Psi_2, \quad \frac{d\Psi_1}{dn} = \frac{d\Psi_2}{dn}. \quad (6)$$

Эти условия означают непрерывность волновой функции и ее производной по нормали n на границе раздела. В сферической модели второе условие представляет собой непрерывность радиальной составляющей градиента волновой функции. Нетрудно убедиться в том, что решения уравнений (3) или (5) будут иметь вид

$$\Psi_1 = \frac{\sin(kr)}{r}, \quad \Psi_2 = D \frac{e^{-qr}}{r}. \quad (7)$$

Для случая параболического закона дисперсии (дырки в InAs и оба типа носителей в GaAs) это решение хорошо известно. Очевидно, что параметр спада волновой функции в GaAs дается формулой

$$q^2 = \frac{2m_2}{\hbar^2} [\Delta E - E(k)]. \quad (8)$$

Параметры k и D находятся из двух граничных условий (6). В случае же электронов в InAs, с непараболическим законом дисперсии, следует убедиться в том,

что функция Ψ_1 в формуле (7) является собственной функцией оператора T из формулы (4). Для этого используем соотношение

$$\nabla^2\Psi_1 = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}(r\Psi_1) = -k^2\Psi_1, \\ \nabla^4\Psi_1 = \nabla^2\nabla^2\Psi_1 = k^2\Psi_1 \text{ и т. д.} \quad (9)$$

Таким образом, получим результат действия любой степени лапласиана

$$\nabla^{2n}\Psi_1 = (-1)^n k^{2n}\Psi_1. \quad (10)$$

В результате операторный ряд (4) превратится в степенной ряд, представляющий собой разложение радикала (2) по степеням k^2 . Итак, мы доказали, что Ψ_1 есть собственная функция, причем собственное значение как функция волнового вектора, $E(k)$, дается формулой (2). Воспользуемся далее двумя граничными условиями (6), для того чтобы найти две величины — волновой вектор k (или энергию $E(k)$) и постоянную D , входящую в волновую функцию Ψ_2 для внешней области. Это приводит к трансцендентному уравнению для волнового вектора (или энергии)

$$k \operatorname{ctg}\left(\frac{kd}{2}\right) = -q, \quad (11)$$

где параметр спада q дается выражением (8). Это уравнение хорошо известно в литературе. Новое состоит в том, что энергия электронов $E(k)$, входящая в формулу (8), описывается непараболическим законом (2). Уравнение (11) может иметь несколько решений, соответствующих различным ветвям котангенса. Чтобы сделать это более очевидным, перепишем (1) в виде

$$k \operatorname{tg}\left(\frac{kd}{2} - \frac{M\pi}{2}\right) = q. \quad (12)$$

Здесь целое число M принимает нечетные значения $M = 1, 3, 5, \dots$, которым и соответствуют различные решения трансцендентного уравнения. При этом аргумент тангенса, $(kd - M\pi)/2$, по модулю будет меньше, чем $\pi/2$. Заметим, что уравнение (12) будет справедливо и для плоской геометрии, т. е. для квантовой ямы, при выполнении граничных условий (6). В этом случае, однако, следует заменить диаметр сферы на толщину квантовой ямы W . Кроме того, в плоской геометрии квантовое число M принимает все целые значения, как нечетные, так и четные, включая нуль. Отметим, что одинаковый вид дисперсионного уравнения как для сферической, так и для плоской геометрии получается только лишь при выполнении условия непрерывности производной на границе сферы.

4. Изменение ширины запрещенной зоны в напряженной структуре

Материал квантовой ямы — это твердый раствор, содержащий 20% In. Постоянная решетки виртуального кристалла будет больше, чем в случае матрицы GaAs.

Благодаря этому материал квантовой ямы окажется сжатым. Для квантовой точки InAs в GaAs подобный эффект должен быть особенно сильным, так как в этом случае разность постоянных решеток кластера и матрицы будет максимальной. Сжатие вызывает увеличение ширины запрещенной зоны материала. Согласно экспериментальным данным, подытоженным в монографии [6], для большинства полупроводников $A^{III}B^V$ изменение ширины запрещенной зоны δE_g от давления p имеет вид нарастающей зависимости при давлениях, меньших 20 кбар, с крутизной $K = 12$ мэВ/кбар, т. е.

$$\delta E_g [\text{эВ}] = 0.12p [\text{ГПа}]. \quad (13)$$

Можно получить формулу (и это будет сделано далее), согласно которой как для сферической квантовой точки, так и для плоской квантовой ямы давление будет связано одинаковым соотношением с относительной величиной рассогласования постоянных решетки $f = \Delta a/a$:

$$p = \frac{2}{3} \frac{E}{1-\nu} f, \quad (14)$$

где E — модуль Юнга, ν — коэффициент Пуассона. Для твердых растворов на основе InAs мы принимаем $E = 50$ ГПа, $\nu = 1/3$ [7]. Оба эти значения — приближенные, с точностью $\sim 10\%$. С учетом значений E и ν имеем

$$p = 50f, \quad (15)$$

и получаем формулу для увеличения запрещенной зоны, из которой исключено давление:

$$\delta E_g [\text{эВ}] = 6f. \quad (16)$$

Обсудим величину рассогласования постоянных решеток f . Для компонентов гетероперехода InAs–GaAs постоянные решетки составляют 6.058 и 5.653 Å, что приводит к значению $f = 0.067$. В случае границы $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ –GaAs концентрация индия в твердом растворе будет в 5 раз меньше. Это значит, что и рассогласование решеток виртуального кристалла относительно кристалла GaAs также будет в 5 раз меньше, т. е. $f = 0.0133$. Согласно формуле (16), в квантовой яме $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ ширина запрещенной зоны вследствие сжатия увеличивается на 0.08 эВ. Увеличение запрещенной зоны внутри квантовой точки InAs составляет величину 0.40 эВ, которая превосходит исходную ширину запрещенной зоны 0.356 эВ. Отсюда следует, что на границе кластера, представляющего собой квантовую точку, не возникает псевдоморфного состояния. Далее мы детально обсудим различные аспекты противоречия экспериментальных данных с приведенной оценкой для квантовой точки. Здесь мы только укажем, что электронный уровень не должен существовать в такой квантовой точке, что противоречит эксперименту. По-видимому, это связано с условиями роста конуса квантовой точки, которая располагается своим широким основанием на

смачивающем слое InAs. По мере заращивания смачивающего слоя арсенидом галлия происходит постепенное затопление конуса арсенидом галлия. Так мы представляем себе отсутствие возникновения растянутого кристалла GaAs, охватывающего конус, благодаря образованию аморфного слоя на поверхности конуса.

5. Расчет энергетических уровней

Возведем в квадрат обе части характеристического уравнения (12). Тогда оно принимает вид

$$E(k) + I(k) = \Delta E. \quad (17)$$

Здесь энергия носителя $E(k)$ отсчитывается от дна соответствующей зоны внутри сферической или плоской потенциальной ямы; $I(k)$ — потенциал ионизации носителя из ямы. Поскольку уравнение (17) справедливо для обоих типов ям, потенциал ионизации в обоих случаях дается одним и тем же выражением

$$I(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_2} \text{tg}^2 \left(\frac{kd}{2} - \frac{M\pi}{2} \right). \quad (18)$$

Рассмотрим сначала условия появления единственного уровня электрона в квантовой точке. При $M = 1$, $k = \pi/d$ равенство (17) дает пороговую величину разрыва в зоне проводимости

$$\Delta E_{te} = E_c(k) = \frac{E_g}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{2\hbar^2 k^2}{m_c E_g}} - 1 \right). \quad (19)$$

Используя значения $d = 2.22$ нм, $E_g = 0.356$ эВ, $m_c = 0.057m_0$, получим $\Delta E_{te} = 0.53$ эВ.

Рассмотрим теперь величину разрыва края зоны проводимости на границе квантовой точки ΔE_c . Будем учитывать деформацию материала из-за несоответствия параметров решетки и используем обычное значение для разрывов зоны проводимости и валентной зоны: $\Delta E_c = 0.65\Delta E_g$, $\Delta E_v = 0.35\Delta E_g$ (ΔE_g — разность запрещенных зон). В случае рассматриваемой квантовой точки $E_g = 0.356$ эВ + 0.40 эВ ≈ 0.76 эВ, откуда следует, что $\Delta E_g = 1.43$ эВ – 0.76 эВ = 0.67 эВ, и, значит, $\Delta E_c = 0.44$ эВ. Полученная величина разрыва оказалась заметно меньше пороговой $\Delta E_{te} = 0.53$ эВ. Отсюда вытекает, что в квантовой точке на существует связанного состояния электрона.

Для разрыва в валентной зоне получаем $\Delta E_v = 0.23$ эВ. Критическая энергия дырки по отношению к образованию связанного состояния, отсчитанная от потолка валентной зоны, есть

$$E_{ih} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_v d^2} \quad (20)$$

и составляет величину 0.17 эВ. Это значение меньше величины разрыва в валентной зоне, равного 0.23 эВ.

Отсюда следует, что в квантовой точке существует связанное состояние дырки.

На захваченной дырке всегда в принципе может быть связан и электрон за счет кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой. Однако энергия связи электрона будет порядка энергии связи экситона в арсениде галлия, т.е. 0.006 эВ. При комнатной температуре все такие связанные экситоны будут практически полностью ионизованы. В итоге линия излучения, обусловленная рекомбинацией электрона и дырки в квантовой точке, не должна наблюдаться. Этот вывод противоречит экспериментальным фактам. Отсюда следует, что напряжение на поверхности квантовой точки должно каким-то образом релаксировать. Нам представляется, что наиболее вероятный механизм релаксации связан с возникновением аморфного слоя арсенида галлия у поверхности кластера. Поэтому в дальнейшем будем предполагать, что барьерное увеличение запрещенной зоны в квантовой точке отсутствует, и в этом предположении вычислим энергии уровней.

Введем безразмерную переменную

$$x = \frac{kd}{2} \quad (21)$$

и используем ее в уравнении (17). Численное решение трансцендентного уравнения (17) для дырок дает $x = 2.02$, откуда получается энергия ионизации дырки по формуле (18) $I_h = 0.07$ эВ. Численное решение трансцендентного уравнения (17) для электронов дает $x = 1.78$, откуда получается энергия ионизации электрона $I_e = 0.07$ эВ. Эти энергии ионизации соответствуют тому случаю, когда квантовая точка заполнена либо только дыркой, либо только электроном. Были использованы значения эффективных масс электронов и дырок в InAs $m_c = 0.057m_0$, $m_v = 0.41m_0$ и эффективных масс электронов и дырок в GaAs $m_c = 0.065m_0$, $m_v = 0.45m_0$. Диаметр сферы, аппроксимирующей квантовую точку, равен 2.22 нм. Критические значения параметра $x = x_1, x_2$ и т.д. соответственно равны $\pi/2, 3\pi/2$ и т.д. Они отвечают появлению в яме новых энергетических уровней. Значения x , являющиеся решениями (17) как для электронов, так и для дырок, лежат внутри интервала $(\pi/2) - (3\pi/2)$, чему соответствует существование только одного уровня.

Рассмотрим далее энергии уровней электрона и дырки в накопительной квантовой яме. Для этого найдем параметры квантовой ямы на основе состава $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$. Ширина запрещенной зоны в ненапряженном материале $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, если рассчитывать ее по известной эмпирической формуле [2]

$$E_g = 0.324 + 0.7x + 0.4x^2, \quad (22)$$

оказывается равной $E_g = 1.14$ эВ при $x = 0.8$. Формула (22) достаточно точна при $x \approx 1$, однако она дает слишком большую погрешность вблизи $x = 0$;

это обстоятельство для нас несущественно, поскольку интересует ширина запрещенной зоны при $x = 0.8$. Выше отмечалось, что барьерное увеличение ширины запрещенной зоны должно составить 0.08 эВ. Таким образом, суммарная ширина запрещенной зоны составляет $E_g(f) = 1.14$ эВ + 0.08 эВ = 1.22 эВ, а разрывы $\Delta E_c = 0.14$ эВ, $\Delta E_v = 0.07$ эВ. Поскольку разрывы зон малы, а ширина ямы велика, применимо параболическое приближение. Рассчитывая по линейной интерполяции эффективные массы носителей в твердом растворе, находим: $m_c = 0.057m_0$, $m_v = 0.0442m_0$. Ширина рассматриваемой ямы равна 8 нм. Численное решение уравнения (12) для электронов дает два решения — $x_1^e = 1.01$, $x_2^e = 1.79$ ($M = 0, 1$) и три в случае дырок — $x_1^h = 1.24$, $x_2^h = 2.4$, $x_3^h = 3.5$ ($M = 0, 1, 2$). Нас интересуют основные уровни для электронов и дырок: $E_0^e = 0.04$ эВ, $E_0^h = 0.01$ эВ. Соответствующие энергии ионизации будут $I_0^e = 0.1$ эВ, $I_0^h = 0.06$ эВ.

Обратим внимание на то, что энергия ионизации дырки из квантовой ямы оказалась близкой к энергии ионизации дырки из квантовой точки. Это означает резонансность ямы и незаполненной квантовой точки для туннелирования дырок. Энергия ионизации электрона из квантовой ямы примерно на 0.03 эВ больше, чем энергия ионизации электрона из квантовой точки. Это означает, что резонансное туннелирование электрона из квантовой ямы в пустую квантовую точку затруднено. Однако если квантовая точка заполнена дыркой, то ситуация изменяется, поскольку возникает кулоновское взаимодействие между туннелирующим электроном и дыркой, которое понижает энергию его уровня в квантовой точке [8].

Оценим энергию кулоновского взаимодействия электрона и дырки, находящихся в квантовой точке. Для этого рассмотрим, как будет изменяться потенциальная энергия электрона при его перемещении от границы квантовой ямы в сторону квантовой точки, когда квантовая точка заполнена дыркой. Эту потенциальную энергию можно считать энергией кулоновского взаимодействия двух точечных зарядов, если только текущее местоположение электрона удалено от центра квантовой точки на расстояние, много большее, чем эффективный радиус локализованной волновой функции дырки на квантовой точке. Когда электрон приблизится к границе квантовой точки, его потенциальная энергия упадет на величину

$$\Delta U = \frac{1}{\epsilon} \frac{e^2}{l}, \quad (23)$$

где e — заряд электрона, $\epsilon = 12.9$ — диэлектрическая проницаемость арсенида галлия, заполняющего пространство между квантовой ямой и квантовой точкой, l — расстояние между границами квантовой ямы и квантовой точки. Примем $l = 4$ нм, тем самым мы считаем эту величину равной расстоянию между границей квантовой ямы и плоскостью слоя квантовых точек. Тогда окажется, что $\Delta U = 0.03$ эВ, и возникает резонанс электронных уровней в квантовой яме и заполненной

дыркой квантовой точке. Когда квантовая точка заполнена электроном и дыркой, происходит нарушение резонанса электронных уровней и восстановление дырочного резонанса, благодаря чему облегчается захват второй дырки. Если до этого захвата не произойдет акта излучательной рекомбинации, то после захвата с подавляющей вероятностью случится безызлучательная оже-рекомбинация. Отметим, что согласно проведенным выше расчетам суммарная энергия ионизации электрона и дырки из квантовой точки будет равна 0.17 эВ, а энергия излучаемого фотона 1.26 эВ, что соответствует экспериментальным данным и служит подтверждением правильности использования модели.

Обсудим теперь вопрос об условиях для волновой функции на гетерогранице. Одно условие является обычным и бесспорным — это непрерывность волновой функции, $\Psi_1 = \Psi_2$. Второе условие должно связывать производные этих функций по нормали к границе. В литературе обычно принимается, что эти производные равны. В некоторых монографиях это утверждение постулируется без комментариев, а в других приводится доказательство. Обычно предполагается наличие скачка дна зоны и отсутствие скачка эффективной массы. Временно заменим ступенчатое изменение функции $U(x)$ на плавное. Если далее провести выкладку, аналогичную осуществляемой в электростатике для доказательства непрерывности нормальной составляющей индукции, получим условие непрерывности нормальной производной волновой функции. В случае наличия скачка эффективной массы возможности для сшивания производных расширяются. Кроме равенства производных появляется равенство

$$\frac{1}{m_1} \frac{d\Psi_1}{dn} = \frac{1}{m_2} \frac{d\Psi_2}{dn}. \quad (24)$$

Можно привести пример, когда именно такое граничное условие дает физически разумный ответ: задача о пролете электрона полупроводника через границу, на которой происходит скачок дна зоны проводимости и эффективной массы, причем энергия электрона больше высоты потенциального барьера.

Нетрудно убедиться, что закон сохранения потока частиц через одиночную гетерограницу не выполняется, если использовать граничное условие $d\Psi_1/dn = d\Psi_2/dn$. Для выполнения закона граничное условие должно иметь вид (24). В справедливости этого утверждения можно убедиться путем прямого вычисления. Граничное условие мы задаем по своему произволу, поскольку оно является частью математической модели рассматриваемой физической задачи. Если рассматривается задача о надбарьерном пролете электрона полупроводника через одиночную гетерограницу, то следует использовать условие (24); если, однако, рассматривается задача о связанном состоянии в двойной гетероструктуре (квантовой яме), то предпочтительнее взять условие непрерывности первой производной, поскольку поток частиц в этой

задаче равен нулю. В том случае, когда это граничное условие окажется несправедливым, только эксперимент может подсказать, чем его следует заменить.

6. Выводы

1. Уровень электрона в незаполненной квантовой точке выше уровня электрона в квантовой яме. При заполнении квантовой точки дыркой этот уровень понижается на величину того же порядка за счет кулоновского взаимодействия электрона с дыркой, что обеспечивает его резонансность с уровнем электрона в квантовой яме.

2. Электрон и дырка в квантовой точке образуют связанный экситон, причем только синглетные связанные экситоны излучают, а триплетные рекомбинируют безызлучательно за счет оже-эффекта. По этой причине квантовый выход (при относительно небольших значениях тока) будет не более 25%.

3. Положение уровня электрона в квантовой точке критическим образом зависит от выбора электронного закона дисперсии. Так, если использовать параболическое приближение с табличным значением эффективной массы $m_c = 0.027m_0$, то связанное состояние электрона в незаполненной дыркой яме не будет существовать. Точно так же не будет связанного состояния в случае непараболического закона дисперсии (2) с $m_c = 0.027m_0$. Если же в яме будет захвачена дырка, то появится связанное электронное состояние [8] с энергией ~ 6 мэВ, соответствующей экситону. Электроны, однако, не смогут удержаться на столь мелком уровне при комнатной температуре, и поэтому лазеры на квантовых точках не могли бы функционировать в таких условиях. Это заключение противоречит опытным данным, из чего следует вывод о необходимости учета непараболического закона дисперсии с $m_c = 0.057m_0$. Эти же соображения заставляют отказаться от учета гидростатического сжатия кластеров арсенида индия и принять такое сжатие лишь для квантовых ям $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$.

Авторы благодарны чл.-корр. РАН Р.А. Сурису за полезное обсуждение работы, а также проф. А.В. Субашиеву за конструктивную критику.

Приложение

Упругие поля квантовых точек и ям

Пусть кристаллические решетки квантовой структуры и окружающей матрицы характеризуются параметрами a_1 и a_2 соответственно. В рамках линейной теории упругие поля, возникающие из-за рассогласования $\Delta a = a_1 - a_2$, будут пропорциональны параметру несоответствия $f = \Delta a/a_1$.

1. Сферическая квантовая точка

Сферическая квантовая точка, имеющая радиус R_0 , может быть представлена упругим дилатационным включением. В этом случае полагают [9,10], что упругий шар радиуса R_0 вставлен в сферическую полость, объем которой меньше объема включения на ΔV . В силу симметрии поле перемещений как внутри шара, $\mathbf{u}^{(1)}$, так и вне, $\mathbf{u}^{(2)}$, имеет только радиальную компоненту, которая зависит только от радиальной координаты r [9]:

$$u_r^{(1)} = -\frac{2(1-2\nu)}{(1+\nu)} \frac{C}{R_0^3} r, \quad (\text{П.1})$$

$$u_r^{(2)} = \frac{C}{r^2}, \quad (\text{П.2})$$

где ν — коэффициент Пуассона (упругие модули квантовой точки и окружающей матрицы полагаются равными), а постоянная C определяется из граничного условия

$$\pi R_0^3 (u_r^{(2)} - u_r^{(1)}) \Big|_{r=R_0} = \Delta V \quad (\text{П.3})$$

и оказывается равной

$$C = \frac{1+\nu}{12\pi(1-\nu)} \Delta V,$$

или

$$C = \frac{1+\nu}{3(1-\nu)} R_0^3 f. \quad (\text{П.4})$$

Во втором равенстве учтено, что изменение объема ΔV связано с параметром несоответствия f соотношением

$$\Delta V = 4\pi R_0^3 f. \quad (\text{П.5})$$

Поле перемещений (П.1) и (П.2) определяет следующие компоненты тензора деформаций (заданные в сферической системе координат):

$$\varepsilon_{rr}^{(1)} = \varepsilon_{\varphi\varphi}^{(1)} = \varepsilon_{\theta\theta}^{(1)} = -\frac{2(1-2\nu)}{3(1-\nu)} f, \quad (\text{П.6})$$

$$\varepsilon_{rr}^{(2)} = -\frac{2(1+\nu)}{3(1-\nu)} \frac{R_0^3}{r^3} f, \quad \varepsilon_{\varphi\varphi}^{(2)} = \varepsilon_{\theta\theta}^{(2)} = \frac{1+\nu}{3(1-\nu)} \frac{R_0^3}{r^3} f. \quad (\text{П.7})$$

Очевидно, что дилатация $\delta = \sum_k \varepsilon_{kk}$ внутри квантовой точки постоянна,

$$\delta^{(1)} = -\frac{2(1-2\nu)}{1-\nu} f, \quad (\text{П.8})$$

а вне точки вообще отсутствует,

$$\delta^{(2)} = 0. \quad (\text{П.9})$$

Поле упругих напряжений находим из (П.6), (П.7) и закона Гука:

$$\sigma_{rr}^{(1)} = \sigma_{\varphi\varphi}^{(1)} = \sigma_{\theta\theta}^{(1)} = -\frac{2E}{3(1-\nu)} f, \quad (\text{П.10})$$

$$\sigma_{rr}^{(2)} = -\frac{2E}{3(1-\nu)} f, \quad \sigma_{\varphi\varphi}^{(2)} = \sigma_{\theta\theta}^{(2)} = -\frac{1}{2} \sigma_{rr}^{(2)}, \quad (\text{П.11})$$

где E — модуль Юнга. Соответственно давление $p = 1/3 \sum_k \sigma_{kk}$ внутри и вне точки оказывается следующим:

$$p^{(1)} = \frac{2E}{3(1-\nu)} f, \quad (\text{П.12})$$

$$p^{(2)} = 0. \quad (\text{П.13})$$

2. Квантовая яма

Выберем декартову систему координат так, чтобы ось y была перпендикулярна поверхностям, ограничивающим яму. Оси x и z параллельны этим поверхностям, а также кристаллографическим плоскостям, вдоль которых задано несоответствие f . Вне ямы упругие деформации и напряжения отсутствуют. Внутри ямы они задаются следующими соотношениями:

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{zz} = -f, \quad \varepsilon_{yy} = \frac{2\nu}{1-\nu} f; \quad (\text{П.14})$$

$$\sigma_{xx} = \sigma_{zz} = -\frac{E}{1-\nu} f, \quad \sigma_{yy} = 0. \quad (\text{П.15})$$

Соответственно дилатация и давление внутри ямы оказываются следующими:

$$\delta = \frac{2(1-2\nu)}{1-\nu} f, \quad (\text{П.16})$$

$$p = \frac{2E}{3(1-\nu)} f. \quad (\text{П.17})$$

Итак, давление внутри сжатой квантовой ямы и квантовой точки описывается одним и тем же выражением (П.17) или (П.12).

Список литературы

- [1] I.V. Kudryashov, V.P. Evtikhiev, V.E. Tokranov, E.Yu. Kotel'nikov, A.K. Kryganovskii, A.N. Titkov. *J. Cryst. Growth*, **201/202**, 1158 (1999).
- [2] Landolt-Bornstein. *New Series, III* (Berlin, Springer) v. 22a.
- [3] J.R. Chelikowsky, M.L. Cohen. *Phys. Rev. B*, **14** (2), 556 (1976).
- [4] К. Зеерер. *Физика полупроводников* (М., Мир, 1977).
- [5] L.V. Asryan, R.A. Suris. *Semicond. Sci. Technol.*, **11**, 554 (1996).
- [6] Р. Смит. *Полупроводники* (М., Мир, 1982).
- [7] T. Benabbas, Y. Androussi, A. Lefebvre. *J. Appl. Phys.*, **86** (4), 1945 (1999).
- [8] В.Е. Бугров, О.В. Константинов. *ФТП*, **32** (10), 1235 (1998).
- [9] Дж. Эшелби. *Континуальная теория дислокаций* (М., Иностран. лит., 1963).
- [10] К. Теодосиу. *Упругие модели дефектов в кристаллах* (М., Мир, 1985).

Редактор Л.В. Шаронова

**Light emission by a semiconductor
structure with a quantum well
and a massed group of quantum dots**

V.P. Evtikhiev, O.V. Konstantinov, A.V. Matveentsev,
A.E. Romanov

Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia