

03,09,12

Экситонные состояния в узких квантовых ямах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

© Н.Р. Григорьева¹, А.В. Михайлов², Е.С. Храмцов², И.В. Игнатъев²

¹ Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Россия

² Лаборатория оптики спина им. И.Н. Уральцева, Санкт-Петербургский государственный университет
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: n.r.grigorieva@spbu.ru

Поступила в Редакцию 12 сентября 2023 г.

В окончательной редакции 12 сентября 2023 г.

Принята к публикации 13 сентября 2023 г.

Исследованы спектры отражения высококачественной гетероструктуры с узкой квантовой ямой $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ($x = 0.022$). Выполнено микроскопическое моделирование экситонного спектра с помощью численного решения трехмерного уравнения Шредингера. Показано, что два экситонных резонанса, находящихся ниже энергии свободного экситона в GaAs, формируются экситоном с тяжелой дыркой, локализованным в квантовой яме. Профиль потенциала квантовой ямы определен в рамках теоретической модели с параметрами, рассчитанными из первых принципов. Для изученной структуры получено соотношение разрывов валентной зоны (E_v) и зоны проводимости (E_c): $E_c : E_v = 64 : 36$.

Ключевые слова: экситоны, поляритоны, гетероструктуры, квантовая яма, микроскопический расчет.

DOI: 10.61011/FIT.2023.11.56543.201

1. Введение

Напряженные структуры $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ широко используют для создания высокоэффективных оптических устройств, таких как светодиоды и полупроводниковые лазеры [1–3], модуляторы и переключатели [4,5]. Узкие квантовые ямы (шириной менее 15 nm) $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ составляют важную часть поляритонных микрорезонаторов и поляритонных логических элементов [6–9].

Электронные свойства устройств на основе полупроводниковых гетероструктур существенным образом зависят от профиля потенциала квантовой ямы (КЯ), в частности, от величины разрывов зон барьерного материала и КЯ. Абсолютное положение экстремумов зон в ненапряженных полупроводниковых материалах, составляющих гетероструктуру, может существенно измениться под действием потенциалов деформации [10–14].

Существуют различные подходы к описанию изменения параметров гетероперехода под действием потенциалов деформации, включающие как теоретические расчеты из первых принципов, так и с помощью параметров, полученных из экспериментальных данных [10–14]. Потенциалы деформации и упругие константы зависят от механических свойств материала, а, следовательно, чувствительны как к геометрии гетероструктуры, так и к ее качеству, определяемую технологией роста. Поэтому до сих пор не разработано единого подхода к определению значений разрывов зон в напряженных гетероструктурах. Величина разрывов зоны проводимости и валентной зоны для гетероструктур $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ также является предметом исследований. Диапазон значений материальных параметров среды изменяется в

достаточно широких пределах для разных концентраций твердого раствора, ширины КЯ и барьеров. Одним из наиболее прецизионных методов изучения электронных свойств полупроводниковых наноструктур является метод экситонной спектроскопии [14–16]. Использование этого метода особенно актуально в свете проектирования и создания поляритонных устройств.

Для достижения требуемых значений добротности резонатора, являющимся основным конструктивным элементом поляритонного устройства, необходимо высокое качество полупроводниковой структуры. Поэтому диапазон концентраций твердого раствора $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, используемого в паре $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, часто ограничивают единицами процентов, чтобы уменьшить генерацию дефектов под действием напряжений из-за несогласования постоянных решетки $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и GaAs. При малой концентрации индия потенциал квантования носителей заряда в узкой КЯ может быть сравним с энергией связи экситона, что затрудняет использование простых моделей для анализа экситонного спектра таких структур.

В структурах с узкими КЯ глубина проникновения волновой функции экситона в подбарьерную область достаточно велика. Одним из преимуществ структур с узкими квантовыми ямами $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ является тот факт, что барьеры формируются арсенидом галлия, поэтому экситон взаимодействует преимущественно с кристаллической решеткой бинарного соединения с малым количеством дефектов. Однако это создает дополнительную трудность при анализе экситонных спектров гетероструктур $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, так как туннелирование дырок в барьеры существенно влияет на эффективные

массы легких и тяжелых дырок, отвечающих за величину энергии связи экситона в узких КЯ [17–21].

В настоящей работе исследован спектр экситонного отражения напряженной гетероструктуры $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ с КЯ с малым содержанием индия, находящейся в окружении широких барьеров. Проанализирован характер экситонного спектра вблизи энергии свободного экситона в GaAs. Методом микроскопического моделирования выделен вклад экситонных резонансов, локализованных в КЯ, и определены их параметры. В рамках выбранной модели определены параметры локализующего потенциала.

Спектры экситонного отражения регистрировались при $T = 8\text{ K}$ по стандартной схеме при нормальном падении света в области экситонных резонансов арсенида галлия и узкой КЯ.

Образец выращен методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) на подложке GaAs с ориентацией (001) при $T = 520^\circ\text{C}$. Структура P552 содержит узкую ($L^{QW1} = 2\text{ nm}$) и широкую ($L^{QW2} = 100\text{ nm}$) КЯ. Номинальные параметры слоев гетероструктуры: подложка GaAs:Si, буферный слой GaAs — 1100 nm (L^{BfL}), КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0.02-0.025$) — 2 nm, барьерный слой GaAs — 130 nm (L^{BrL}), КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0.02-0.025$) — 100 nm, покрывающий слой GaAs — 70 nm (L^{CL}).

2. Спектры экситонного отражения

В спектре отражения, ниже линии основного состояния свободного экситона в арсениде галлия (1515 meV), наблюдаются 2 узких резонанса X1 и X2, см. рис. 1. Выше энергии 1515 meV можно выделить 3 узкие особенности X3, X4 и X5 со значительной амплитудой.

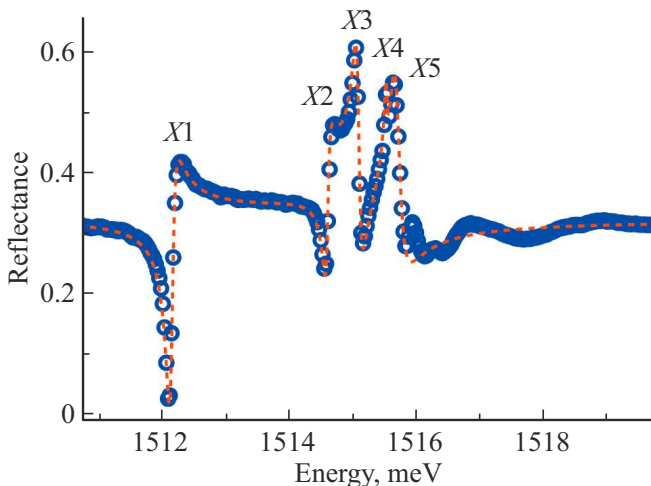


Рис. 1. Экспериментальный спектр отражения образца P552 (кружки). Модельный спектр отражения, рассчитанный с использованием выражения (1) и значениями параметров, приведенными в табл. 1 (пунктирная линия).

Таблица 1. Параметры экситонных резонансов для модельного расчета с использованием выражения (1)

Резонанс	X1	X2	X3	X4	X5
$\hbar\omega_0$, meV	1512.17	1514.62	1515.09	1515.59	1515.69
$\hbar\Gamma_0$, μeV	51	18	27	3.6	41
$\hbar\Gamma_{NR}$, μeV	38	40	30	21	55
φ , rad	3.73	4.09	1.40	0.73	1.01

Для определения параметров экситонных резонансов был проведен анализ спектра отражения в рамках модели нелокального диэлектрического отклика изолированных экситонных резонансов [22]. Согласно модели, коэффициент отражения дается выражением

$$R(\omega) = \left| \frac{r_s(\omega) + \sum_j r_{Xj}(\omega) \exp(2i\varphi_j)}{1 + r_s(\omega) \sum_j r_{Xj}(\omega) \exp(2i\varphi_j)} \right|^2, \quad (1)$$

где $r_s(\omega)$ — френелевский коэффициент отражения от границы гетероструктуры; φ_j — сдвиг фазы электромагнитной волны, отраженной от КЯ, находящейся на определенном расстоянии от поверхности гетероструктуры; r_{Xj} — амплитудный коэффициент отражения изолированного экситонного резонанса. Он дается выражением

$$r_{Xj}(\omega) = \frac{i\Gamma_0}{(\omega_0 - \omega) - i(\Gamma_0 + \Gamma_{NR})},$$

где ω_0 — резонансная частота экситона Γ_0 — радиационное затухание, Γ_{NR} — нерадиационное затухание.

Значения резонансных частот, радиационного и нерадиационного затухания, а также фазы экситонных резонансов, дающих наилучшее описание особенностей в интервале от 1512 до 1516 meV, приведены в табл. 1. Следует отметить, что возбужденные экситонные состояния X2–X5 расположены достаточно близко друг к другу, так что энергетические зазоры между ними сопоставимы с радиационным уширением резонансов. В этом случае для более точного определения параметров этих экситонных состояний необходимо использовать обобщенную теорию, описанную в работах [23–26]. Эта теория, однако, требует сложного теоретического моделирования, поэтому мы ограничимся здесь простым анализом, основанным на формулах (1) и (2). При этом мы будем иметь в виду, что параметры, приведенные в табл. 1 для этих состояний, имеют приближенные значения.

3. Микроскопическая модель. Гамильтониан

Для того, чтобы выделить вклад узкой КЯ и уточнить природу наблюдаемых линий, было проведено микроскопическое моделирование спектра экситонных состояний

гетроструктуры с узкой КЯ, находящейся в окружении широких барьеров. При моделировании определялись положения экситонных резонансов, величина радиационного затухания и энергия связи экситона. В рамках микроскопической модели для изолированного экситонного состояния поведение экситона в КЯ может быть описано гамильтонианом [16,22]:

$$H_{diag} = \frac{k_e^2}{2m_e} + \frac{(k_{hx}^2 + k_{hy}^2)}{2m_{xy}} + \frac{k_{hz}^2}{2m_{hz}} - \frac{e^2}{\varepsilon|r_e - r_h|} + V_e(r_e) + V_h(r_h),$$

где $V_e(r_e)$ описывает профиль потенциала зоны проводимости в КЯ, $V_h(r_h)$ — профиль потенциала валентной зоны в КЯ, m_{xy} — эффективная масса дырки в плоскости КЯ; m_{hz} — эффективная масса дырки в направлении, перпендикулярном плоскости КЯ; ε — диэлектрической проницаемость. Конкретный вид и параметры потенциалов электрона $V_e(r_e)$ и дырки $V_h(r_h)$ определяются условиями роста слоя твердого раствора $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0.02-0.025$).

Независимая от спиновых переменных часть волновой функции экситона может быть представлена в виде [16,22]:

$$\psi(x, y, z_e, z_h) = \varphi(z_e, z_h, \rho) \exp(ik_\phi \phi),$$

где $x = x_h - x_e$; $y = y_h - y_e$; ρ и ϕ — цилиндрические координаты, описывающие относительное движение электрона и дырки в плоскости КЯ. В свою очередь, $\varphi(z_e, z_h, \rho)$ определяется параметрами и профилем потенциала КЯ [22]. В пределе широких КЯ можно выделить сомножители описывающие движение центра масс экситона вдоль оси z и относительное движение электрона и дырки за счет кулоновского взаимодействия

$$\varphi(z_e, z_h, \rho) = F(Z) \exp(-r/a_B) / \sqrt{\pi a_B^3},$$

где a_B — радиус Бора экситона. Для узких КЯ с бесконечными стенками функция $\varphi(z_e, z_h, \rho)$ стремится к двумерному пределу

$$\varphi(z_e, z_h, \rho) = \sqrt{2/\pi} (4/Wa_B) \cos(\pi z_e W) \times \cos(\pi z_h / W) \exp(-2\rho/a_B),$$

где W — ширина КЯ.

Энергия связи экситона может быть получена следующим образом [16,22]:

$$E_b = E_{e1} + E_{h1} - \langle \varphi | H_{diag} | \varphi \rangle = E_{e1} + E_{h1} - E_x, \quad (2)$$

где E_{e1} — уровень квантования электрона относительно дна зоны проводимости в КЯ, E_{h1} — уровень квантования дырки относительно потолка валентной зоны в КЯ, E_x — смещение положения уровня экситонного состояния относительно ширины запрещенной зоны в КЯ.

Величина радиационного уширения, согласно [16,22], определяется выражением

$$\hbar\Gamma_0 = 2\pi\mathbf{q}/\varepsilon(e|\mathbf{p}_{cv}|/m_0\omega_0)^2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(z) \exp(i\mathbf{q}z) dz \right|^2, \quad (3)$$

где \mathbf{q} — волновой вектор фотона; $|\mathbf{p}_{cv}|$ — матричный элемент межзонного перехода; $\Phi(z) \equiv \varphi(z_e = z_h = z, \rho = 0)$ — сечение волновой функции экситона при совпадающих координатах электрона и дырки.

4. Потенциал КЯ

4.1. Влияние механических напряжений

Расогласование постоянных решетки $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и GaAs приводит к механическому напряжению слоя твердого раствора. При этом разрыв зон определяется как концентрацией твердого раствора, так и напряжением, влияющим на сдвиг зон и величину расщепления зон легкой и тяжелой дырок [9–14,17]. Изменение ширины запрещенной зоны за счет гидростатического сжатия для гетроструктуры, выращенной вдоль направления (001), дается выражением

$$\delta E^H = a(x)(2 - \lambda^{001}(x))\varepsilon(x),$$

где $\varepsilon(x) = (a_0(x) - a_0)/a_0$ — деформация за счет изменения постоянной решетки a_0 в слое твердого раствора; $a(x) = a_v(x) + a_c(x)$ — гидростатический деформационный потенциал; $\lambda^{001}(x) = 2c_{12}(x)/c_{11}(x)$, где $c_{11}(x)$ и $c_{12}(x)$ — константы упругой жесткости. Сдвиг края зоны проводимости и края валентной зоны в твердом растворе под действием гидростатического сжатия (растяжения) можно задавать либо постоянным коэффициентом Q^H , тогда $a_c(x) = a(x)Q^H/(1 + Q^H)$, $a_v(x) = a(x)/(1 + Q^H)$, либо помощью интерполяции между значениями a_v и a_c для GaAs и InAs .

Расщепление валентных зон легкой и тяжелой дырок за счет сжатия вдоль направления (001):

$$\delta E^S = -b(x)(1 + \lambda^{001}(x))\varepsilon(x),$$

где $b(x)$ — деформационный потенциал сдвига.

С учетом возникающих напряжений, положение края зоны проводимости и валентных зон легкой и тяжелой дырок дается выражениями

$$E_c = \frac{Q}{1 + Q} E_g^{\text{InGaAs}} + a_c(x)\delta E^H, \\ E_v(hh) = \frac{1}{1 + Q} E_g^{\text{InGaAs}} + a_v(x)\delta E^H - \delta E^S, \\ E_v(lh) = \frac{1}{1 + Q} E_g^{\text{InGaAs}} + a_v(x)\delta E^H - [\Delta_{SO} - \delta E^S]/2 + 1/2\sqrt{\Delta_{SO}^2 + 2\Delta_{SO}\delta E^S + 9(\delta E^S)^2},$$

где Δ_{SO} — величина спин-орбитального расщепления; Q — соотношение разрывов зон проводимости и ва-

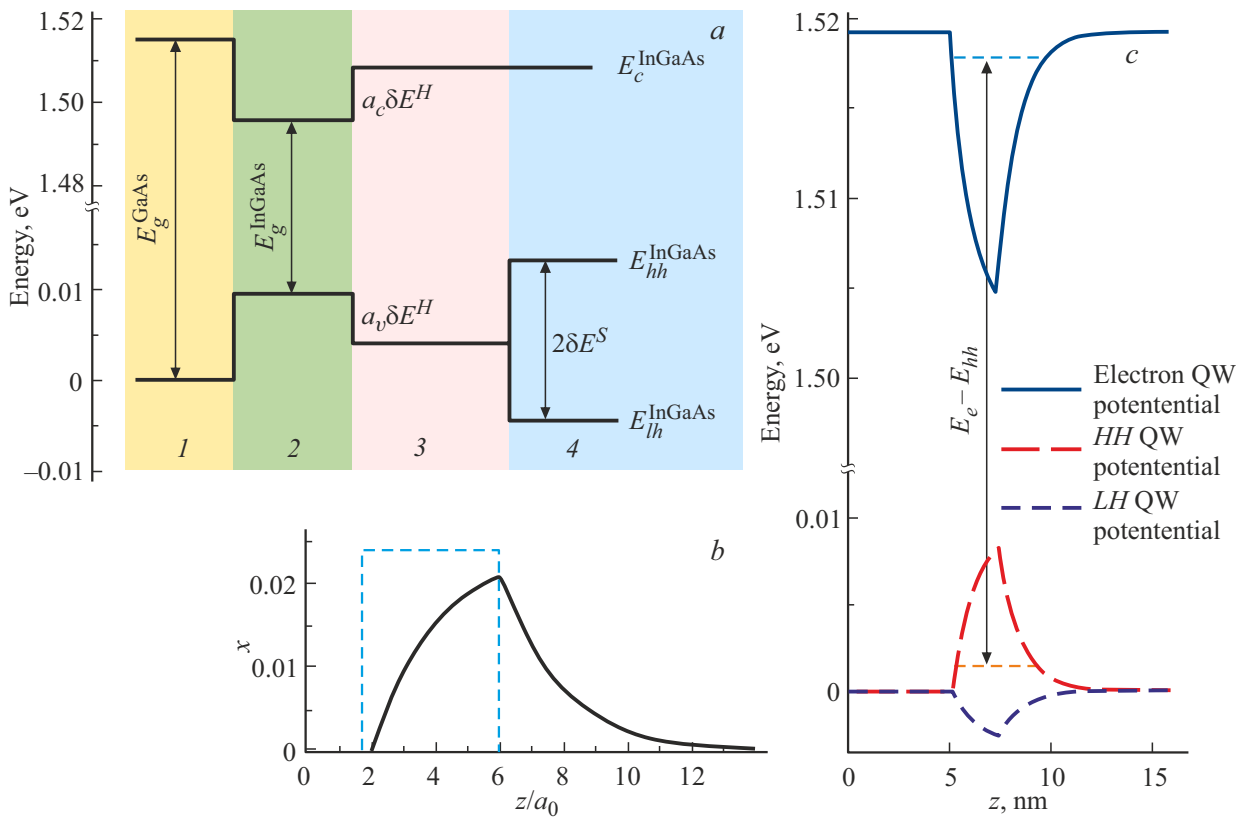


Рис. 2. *a* — положение краев зоны проводимости и зон легкой и тяжелой дырок: 1 — в арсениде галлия; 2 — в ненапряженном твердом растворе $In_xGa_{1-x}As$; 3 — в твердом растворе $In_xGa_{1-x}As$ с учетом гидростатического напряжения; 4 — в твердом растворе $In_xGa_{1-x}As$ с учетом гидростатического и одноосного напряжения. *b* — изменение концентрации атомов In в зависимости от номера слоя (z/a_0): без учета сегрегации (штриховая линия) под действием сегрегации (сплошная линия); *c* — модель потенциала КЯ: сплошная линия — КЯ для электрона, штриховая линия — КЯ для тяжелой дырки, пунктирная линия — барьер для легкой дырки. Стрелкой указан переход между уровнями размерного квантования электрона и тяжелой дырки.

лентной зоны в КЯ с ненапряженным слоем твердого раствора $In_xGa_{1-x}As$ (рис. 2, *a*).

Для легкой дырки в данном диапазоне концентраций индия формируется потенциальный барьер. Связанное состояние при этом формируется за счет кулоновского потенциала электрона в КЯ и легкой дырки [14,18].

4.2. Эффект сегрегации

Для структур GaAs/ $In_xGa_{1-x}As$ профиль концентрации в слое твердого раствора определяется процессом сегрегации атомов In. Согласно модели [16], его можно описать формулой

$$f(z) = \begin{cases} [1 - \exp(-z/\lambda_d)], & 0 < z < L^{QW}, \\ [1 - \exp(-z/\lambda_d)] \exp(-(z - L)/\lambda_d), & z > L^{QW}. \end{cases}$$

Здесь L^{QW} — ширина КЯ (толщина слоя, выращенного при открытой заслонке); λ_D — параметр, описывающий эффективную длину сегрегации (рис. 2, *b*), $\lambda_D = 5.79$ nm при $T = 520^\circ C$ [16].

4.3. Эффективные массы легких и тяжелых дырок

Существенным параметром, определяющим энергию связи экситона, является эффективная масса легкой и тяжелой дырок в плоскости КЯ. Эффективная масса дырок в КЯ определяется концентрацией твердого раствора, степенью локализации волновой функции легкой и тяжелой дырки в КЯ и величиной напряжения в локализирующем слое [11,12,17]. В КЯ с бесконечными барьерами, эффективная масса легкой и тяжелой дырок в плоскости, параллельной гетерогранице, дается выражением: $m_{xy} = 1/(\gamma_1 \pm \gamma_2)$, где γ_1, γ_2 — параметры Латтинжера.

Для узкой КЯ степень делокализации волновых функций велика, и, согласно теоретическому расчету [17], эффективная масса легкой дырки в плоскости ямы, m_{xy} , при уменьшении ширины КЯ стремится к величине m_{lh} , а эффективная масса тяжелой дырки стремится к значению $\sqrt{m_{hh}m_{lh}}$, где $m_i = 1/(\gamma_1 \mp 2\gamma_2)$ значение для тяжелой (верхний знак) и легкой (нижний знак) дырок. Следует отметить, что изменение величины эффективной массы легкой и тяжелой дырок в узких КЯ $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ конечной глубины относительно

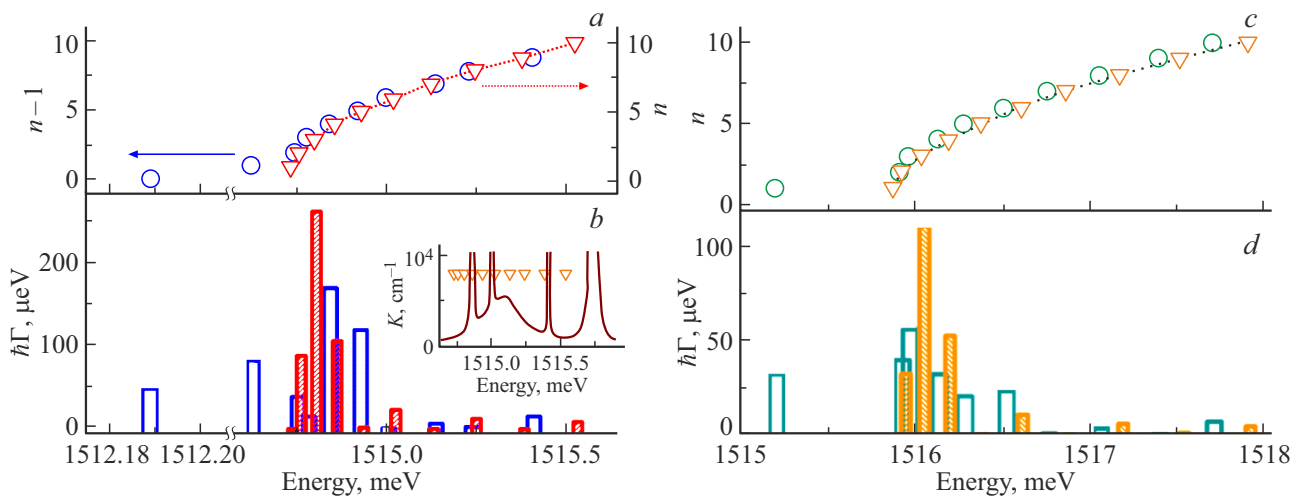


Рис. 3. Спектр экситонов с тяжелой и легкой дырками, полученный в рамках микроскопического расчета. Для экситона с тяжелой дыркой: (a) — зависимости номера состояния от его энергии; кружки — гетероструктура с КЯ, треугольники — однородный слой; (b) — зависимость радиационного уширения от энергии: белые столбики — гетероструктура с КЯ, заштрихованные столбики — однородный слой. (c) и (d) — то же самое для экситона с легкой дыркой. Вставка: сплошная линия — спектр коэффициента поглощения, треугольники — энергии экситонных резонансов, полученные в микроскопическом расчете.

массы $m_{xy} = 1/(\gamma_1 \pm \gamma_2)$, полученной для КЯ с бесконечными барьерами, также наблюдалась экспериментально [18–21].

5. Микроскопический расчет

Особенностью моделирования экситонного спектра узкой КЯ является необходимость учета сильного проникновения волновых функций экситонов, локализованных в барьеры. Поэтому отдельной задачей являлся выбор ширины области интегрирования (W_{int}). В связи с этим, моделирование экситонного спектра проводилось при варьировании ширины области интегрирования.

Для того, чтобы выделить экситонные состояния, локализованные в КЯ, было проведено сравнение спектра экситонных состояний области, содержащей КЯ (гетероструктуры с КЯ), и области, не содержащей КЯ (однородного слоя). Микроскопический расчет проводился для 10 экситонных состояний с тяжелой дыркой и 10 состояний с легкой дыркой.

Сравнение спектров экситонных состояний с тяжелой и легкой дырками для гетероструктуры с КЯ и однородного слоя, полученных с помощью микроскопического расчета, приведено на рис. 3. Состояния экситонного спектра гетероструктуры с КЯ можно разделить на два типа. Энергетическое положение и величина радиационного затухания состояний с $n(hh) = 1$ и $n(hh) = 2$ для экситона с тяжелой дыркой (рис. 3, a–b), а также с $n(lh) = 1$ для экситона с легкой дыркой (рис. 3, c–d), определяются параметрами потенциала узкой КЯ и не зависят от величины W_{int} при $W_{int} > 300 \text{ nm}$. При этом энергетический интервал между состояниями $n(hh) = 1$ и $n(hh) = 2$ определяется соотношением разрывов зон

в КЯ. Таким образом, состояния с $n(hh) = 1$ и $n(hh) = 2$ для экситона с тяжелой дыркой и с $n(lh) = 1$ для экситона с легкой дыркой можно отнести к состояниям, локализованным КЯ.

Спектр состояний с $n > 2$ для экситона с тяжелой дыркой для гетероструктуры с КЯ и для однородного слоя хорошо соответствуют друг другу, если произвести замену (сдвиг) $n \rightarrow n-1$ (рис. 3, a). Для экситона с легкой дыркой положения энергетических уровней с $n > 1$ для гетероструктуры с КЯ хорошо совпадает с зависимостью от n для однородного слоя (рис. 3, c). Такие состояния отнесем к делокализованным экситонным состояниям. Их спектр, как и спектр экситона в однородном слое толщины W_{int} , можно представить, как точки на дисперсии механического экситона в объемном материале [27]. Параметры спектра делокализованных состояний малочувствительны к потенциалу узкой КЯ. Микроскопический расчет показывает, что величина радиационного уширения экситонных резонансов с $1 < n(hh) < 4$ для однородного слоя и для гетероструктуры с КЯ с $3 < n(hh) < 6$ превышает энергетический зазор между ними. Это указывает на формирование области непрерывного спектра.

Как указывалось выше, методы, применяемые для изолированных экситонных состояний, в этом случае не могут дать корректного описания вклада экситонных состояний в оптические спектры. Вместе с тем для однородного слоя с шириной $W > 12a_B^{exc}$, моделирование вклада экситонных состояний в оптические спектры можно провести в рамках формализма диэлектрической проницаемости с учетом пространственной дисперсии [27,28]. Особенности оптических спектров в области экситонных резонансов можно рассматривать с точки зрения интерференции поляритонных волн на слое ко-

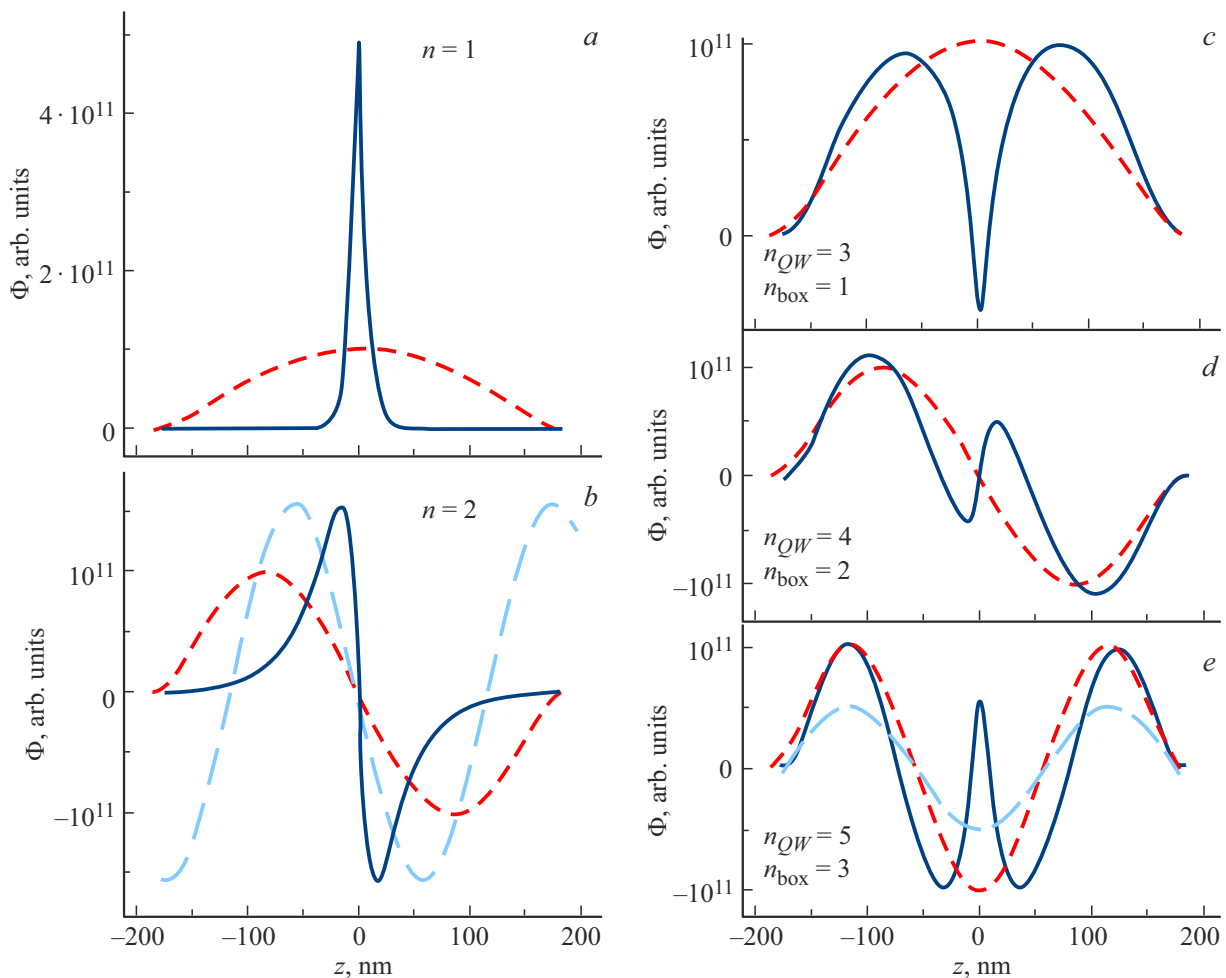


Рис. 4. Функции $\Phi(z)$ первых 5 экситонных резонансов для гетероструктуры с КЯ (сплошные линии) и без КЯ (пунктирные линии), рассчитанные с параметрами экситона с тяжелой дыркой. Номера состояний, n_{QW} (гетероструктуры с КЯ) и n_{box} (для однородного слоя), указаны на рисунке. Пространственное распределение напряженности электрического поля электромагнитной волны ($\lambda = 818 \text{ nm}$) в среде с $\epsilon = 12.53$ показано штриховыми линиями.

нечной толщины, как в случае невырожденных [27], так и в случае вырожденных зон [29].

Наиболее прямую информацию об энергетическом положении экситонных состояний можно получить из спектра поглощения. Спектр поглощения для слоя конечной толщины можно рассчитать по спектрам отражения и пропускания [30]. В области, где располагается квазинепрерывный экситонный спектр, коэффициент поглощения определяется, в первую очередь, мнимой частью коэффициентов преломления экситонной и фотоподобной моды [31]. На вставке рис. 3, *b* приведен спектр коэффициента поглощения, рассчитанный в формализме диэлектрической проницаемости с учетом пространственной дисперсии для слоя толщиной 361.6 nm, нерадикационного уширения $\hbar\Gamma_{NR} = 7.5 \mu\text{eV}$, с учетом вклада экситона с тяжелой дыркой. Положение длинноволнового края квазинепрерывного спектра согласовано с микроскопическим расчетом. В интервале от 1514.73 до 1515.4 meV наблюдается полоса квазинепрерывного спектра экситонных состояний. Расположенные выше по

энергии отдельные максимумы соответствуют уровням размерного квантования экситона с тяжелой дыркой в слое толщиной W_{int} . Максимумы расчетного коэффициента поглощения и положения экситонных резонансов, полученных из микроскопического расчета, хорошо соответствуют друг другу (рис. 3, *b* вставка).

Пространственное распределение функции $\Phi(z)$ также подтверждает деление экситонных состояний в слое с КЯ на два типа: локализованных в области КЯ и делокализованных. Вид функции $\Phi(z)$ для экситонов с легкой и тяжелой дырками в однородном слое ожидаемо соответствует виду соответствующей функции в задаче о квантовании центра масс экситона в бесконечно глубокой КЯ шириной W_{int} .

Сравнение функций $\Phi(z)$ для первых двух экситонных состояний в гетероструктуре с КЯ и однородном слое подтверждает локализацию экситонных состояний с $n(hh) = 1$ и $n(hh) = 2$ для экситонов с тяжелой дыркой (рис. 4, *a, b*) и с $n(lh) = 1$ для экситона с легкой дыркой (рис. 5, *a*), рассматриваемым в рамках

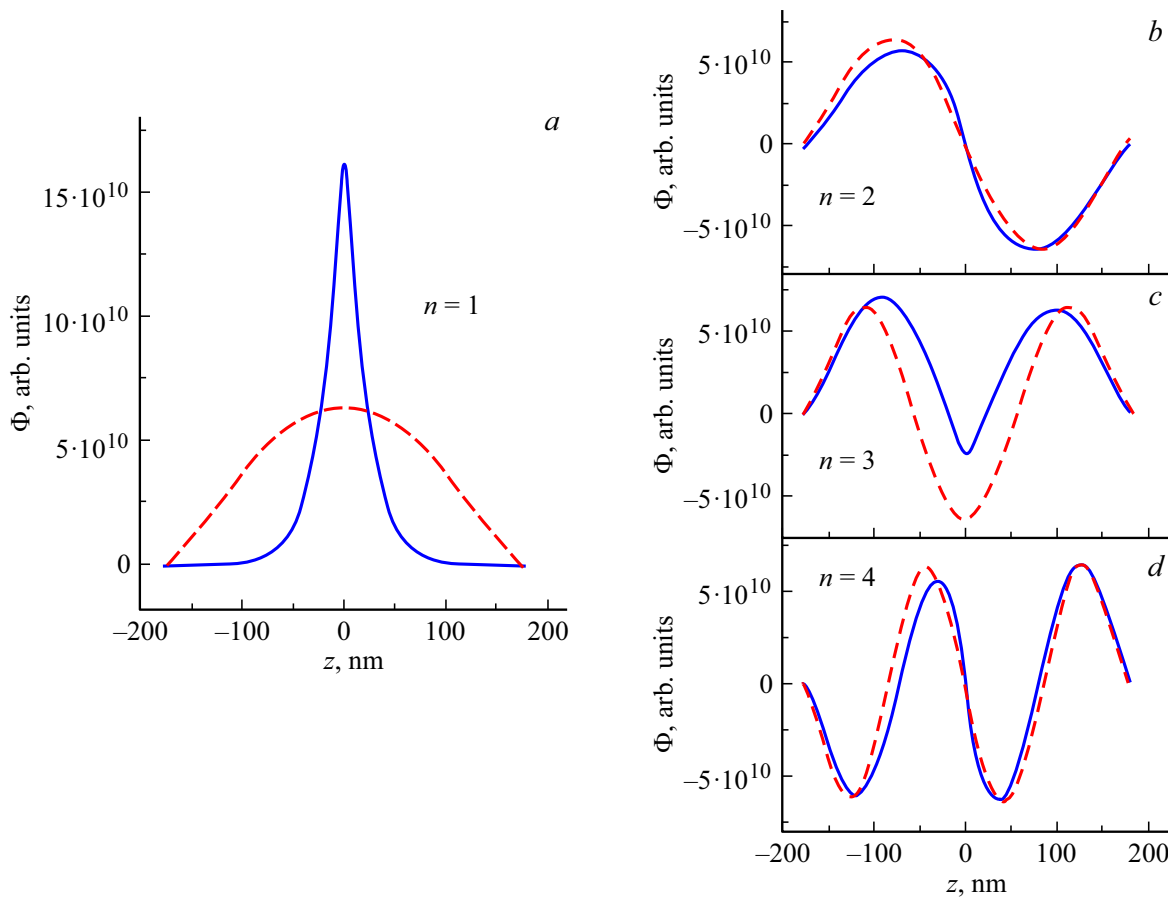


Рис. 5. Функции $\Phi(z)$ первых 4 экситонных резонансов для гетероструктуры с КЯ (сплошные линии) и однородного слоя (пунктирные линии), рассчитанные с параметрами экситонов с легкой дыркой.

настоящего исследования потенциалом КЯ. Функция $\Phi(z)$ для гетроструктуры с КЯ состояния с $n(hh) = 1$ наиболее сильно локализована в области КЯ (рис. 4, *a*). Изменение вида функции $\Phi(z)$ гетроструктуры с КЯ для состояния $n(hh) = 2$ относительно $\Phi(z)$ $n(hh) = 2$ для однородного слоя также указывает на значительное действие локализирующего потенциала узкой КЯ на это состояние (рис. 4, *b*).

Сравним функции $\Phi(z)$ экситонных состояний для однородного слоя и делокализованных экситонных состояний гетероструктуры с КЯ. На рис. 4, *c-e* сопоставлены функции $\Phi(z)$ для первых трех состояний в однородном слое ($n_{box} = 1, 2, 3$) и для первых трех делокализованных состояний в гетроструктуре с КЯ ($n_{QW} = 3, 4, 5$). Для делокализованных состояний экситона в гетроструктуре с КЯ функции $\Phi(z)$ занимают всю область интегрирования по z , также как для однородного слоя. В области барьеров $\Phi(z)$ гетроструктуры с КЯ хорошо соответствует поведению $\Phi(z)$ для однородного слоя. Влияние КЯ на делокализованные состояния экситона с тяжелой дыркой проявляется в перераспределении функции $\Phi(z)$ вблизи КЯ (рис. 4, *c-e*).

Для экситона с легкой дыркой функции $\Phi(z)$ четных состояний гетроструктуры с КЯ и однородного слоя в основном совпадают (рис. 5, *b, d*). Для нечетных

делокализованных состояний наблюдается уменьшение амплитуды вероятности функции $\Phi(z)$ вблизи КЯ, по сравнению с распределением амплитуды вероятности этой функции для однородного слоя (рис. 6, *c*). Это можно связать с отталкивающим действием барьера, формируемого слоем $In_xGa_{1-x}As$ ($x < 0.2$), для легкой дырки.

Обращает на себя внимание, что в рамках микроскопического расчета величина радиационного затухания экситонного состояния $n(hh) = 1$ меньше, чем $n(hh) = 2$. Это объясняется различием в интегралах перекрытия функции $\Phi(z)$ и напряженности электрического поля световой волны в GaAs с волновым вектором q , соответствующим длине волны 818 нм. Функция $\Phi(z)$ для $n(hh) = 1$ сильно локализована, и значение напряженности поля световой волны при расчете $\hbar\Gamma_0$ можно считать постоянной величиной. При этом величина радиационного затухания хорошо совпадает с величиной силы осциллятора [16,22,24,25]. Функция $\Phi(z)$ состояния $n(hh) = 2$ занимает более широкую область. Сопоставление функции $\Phi(z)$ $n(hh) = 2$ и амплитуды световой волны, пропорциональной $\sin(\mathbf{qr})$, позволяет сделать вывод о большей величине интеграла (3), для состояния $n(hh) = 2$, чем для состояния $n(hh) = 1$.

В рамках выбранной модели длинноволновая часть экситонного спектра формируется локализованными КЯ экситонами с тяжелой дыркой. При этом состояния $n(hh) = 1$ и $n(hh) = 2$ находятся ниже энергии экситона в GaAs (1515 meV). Эти состояния можно соотнести с резонансами X1 и X2 в экспериментальном спектре отражения. Выше по энергии располагается полоса квазинепрерывного спектра и уровни размерного квантования экситона в гетероструктуре с КЯ. Спектр состояний экситонов с легкой дыркой, благодаря расщеплению валентной зоны под действием напряжения, располагается выше энергии 1515 meV.

6. Определение параметров локализирующего потенциала и анализ спектра отражения

Для подбора параметров локализирующего потенциала была выбрана область шириной $W_{int} = 640a_0 = 361.6$ nm. Наилучшее совпадение с экспериментальным положением экситонных резонансов X1 и X2 с резонансными частотами состояний $n(hh) = 1$ и $n(hh) = 2$, полученных при микроскопическом расчете, достигается при следующих параметрах, задающих потенциал узкой КЯ. Концентрация индия: $x = 0.022$, ширина КЯ: $L^{QW1} = 4a_0 = 2.26$ nm. При моделировании потенциала КЯ были использованы следующие значения материальных параметров:

$$\varepsilon = 12.53 + 1.08x, \quad a_v = -1.16 + 0.16x,$$

$$a_c = -7.17 + 2.09x, \quad b = -1.90 + 0.35x,$$

$$c_{11}(x) = 12.25 - 3.921x, \quad c_{12}(x) = 5.71 - 1.184x,$$

приведенные в работах [12,14], а также $Q = 85 : 15$ [10,13,15]. Значения параметров γ_1, γ_2 рассчитаны в соответствии с данными, приведенными в работе [16]. При этом получилось следующее соотношение разрывов зон проводимости и валентной зоны тяжелых дырок $E_c : E_v = 64 : 36$. Таким образом, экспериментальные данные хорошо описываются значениями материальных параметров, рассчитанных из первых принципов на основе теоретического подхода, изложенного в работе [10]. Данный подход представляет область интерфейса в виде кристалла, состоящего из нейтральных сферических атомов, псевдопотенциалы для которых рассчитываются из первых принципов, и использует приближение локальной плотности для расчета зонной структуры. Он позволяет привести положения краев зон веществ, образующих гетеропереход, к абсолютной энергетической шкале и учесть их изменение под действием упругих напряжений. Данный подход должен давать хорошие результаты для псевдоморфного слоя, которым является узкая КЯ в гетероструктуре высокого качества.

Итоговая модель локализирующего потенциала приведена на рис. 2, с. При этом следует отметить, что при расчете параметров экситонных состояний для экситона

Таблица 2. Параметры экситонных состояний, локализованных в области КЯ, полученные при помощи микроскопического расчета

Резонанс	$n(hh) = 1$	$n(hh) = 2$	$n(lh) = 1$
$\hbar\omega_0$, meV	1512.19	1514.63	1515.19
$\hbar\Gamma_0$, μ eV	51	79	11
E_x , meV	16.17	18.61	8.37

с тяжелой дыркой величина ширины запрещенной зоны определялась как, энергетический интервал между минимумом потенциала электрона проводимости (рис. 2, с, сплошная линия) и максимумом потенциала тяжелой дырки (рис. 2, с, штриховая линия). А при расчете параметров экситонных состояний для экситона с легкой дыркой величина ширины запрещенной зоны определялась как, энергетический интервал между минимумом потенциала электрона проводимости (рис. 2, с, сплошная линия) и минимумом потенциала легкой дырки (рис. 2, с, пунктирная линия). Параметры экситонных состояний, локализованных в области КЯ, полученные с помощью микроскопического расчета приведены в табл. 2.

Зная параметры экситонных состояний и потенциала квантовой ямы можно проанализировать природу наблюдаемых экситонных переходов. Произведем оценку энергии связи экситона, подставив в выражение (2) параметры, полученные с помощью микроскопического расчета (табл. 2), и положениями экситонных резонансов X1 и X2, полученными непосредственно из экспериментальных данных (см. табл. 1).

Величины E_{e1} и E_{h1} можно определить, решая однумерную задачу методом микроскопического моделирования для итоговой модели локализирующего потенциала. Уровень электрона в КЯ равен $E_{e1} = 14.30$ meV, для тяжелой дырки $E_{h1} = 7.42$ meV.

Воспользовавшись значениями E_{e1} и E_{h1} можно оценить энергию возможных межзонных переходов в гетероструктуре с КЯ (рис. 6, а) и для каждого из них оценить энергию связи экситона, зная положения экситонных резонансов X1 и X2. Для пространственно прямого перехода $E_{e1} - E_{h1} E_b^{X1} = 5.55$ meV, $E_b^{X2} = 3.11$ meV; для пространственно непрямого переходов: $E_c - E_{h1} E_b^{X1} = 6.15$ meV; $E_b^{X2} = 3.72$ meV; для перехода $E_{v(hh)} - E_{e1} E_b^{X1} = 6.41$ meV, $E_b^{X2} = 3.97$ meV.

Энергия связи экситона, рассчитанная с помощью данных микроскопического расчета для $n(hh) = 1$ будет равна $E_b^{n1} = 5.55$ meV, для $n(hh) = 2$ составит $E_b^{n2} = 3.11$ meV. Таким образом, величины E_b^{n1} и E_b^{n2} совпадают с энергиями связи экситонов для пространственно прямого перехода. Можно сделать вывод, что резонансы X1 и X2, наблюдаемые в спектре отражения, являются вкладами основного и первого возбужденного состояния экситона с тяжелой дыркой пространственно прямого перехода в КЯ. Спектр, локализованных КЯ экситонных состояний с тяжелой дыркой, представлен 2-мя состояниями и не описывается моделью для водородоподобной системы с дробной размерностью [32].

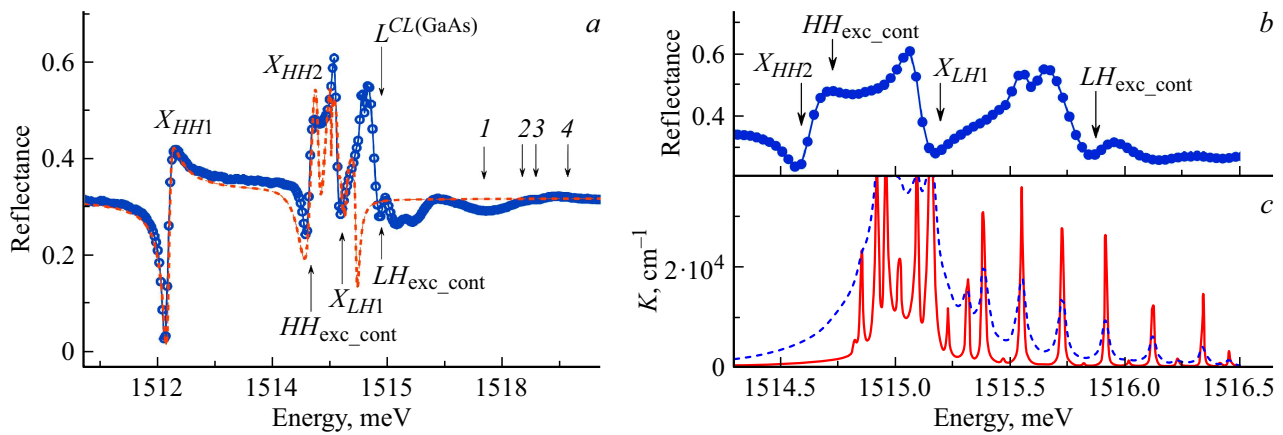


Рис. 6. *a* — экспериментальный спектр отражения образца P552 (кружки); модельный спектр отражения, рассчитанный с помощью выражения (3) с параметрами, полученными из микроскопического расчета (пунктирная линия); *b* — экспериментальный спектр отражения образца P552 (кружки); *c* — спектр коэффициента поглощения, рассчитанного в формализме диэлектрической проницаемости с учетом пространственной дисперсии для области шириной 1232 nm: $\Gamma_{NR} = 7.5 \mu\text{eV}$ — сплошная линия, $\Gamma_{NR} = 37.5 \mu\text{eV}$ — пунктирная линия. Стрелками отмечены: $HH_{\text{exc_cont}}$ — положение длинноволнового края квазинепрерывного спектра экситона с тяжелой дыркой; $LH_{\text{exc_cont}}$ — положение длинноволнового края квазинепрерывного спектра экситона с легкой дыркой; $L^{CL(GaAs)}$ — положение первого экситонного резонанса в покровном слое гетроструктуры (данные микроскопического расчета); 1 — переход $E_{e1} - E_{h1}$; 2 — переход $E_c^{GaAs} - E_{h1}$; 3 — переход $E_{e1} - E_v^{GaAs}$; 4 — переход $E_c^{GaAs} - E_v^{GaAs}$.

Такую же оценку можно провести для экситона с легкой дыркой. В этом случае положение экситонного состояния $n(lh) = 1$ можно определить только из микроскопического расчета (см. табл. 2). Энергия связи экситона, полученная с использованием выражения (2) и значения параметра E_x , полученного из микроскопического расчета: $E_b^{LH} = 3.38 \text{ meV}$. Используя значения параметра E_{e1} , можно показать, что для пространственно прямого перехода $E_{v(lh)}^{InGaAs} - E_{e1}$ энергия связи должна составить не менее 5.93 meV. В то же время для пространственно непрямого перехода $E_{v(lh)}^{GaAs} - E_{e1}$ энергию связи можно оценить как $E_b^{LH} = 3.41 \text{ meV}$. Следовательно, экситонное состояние $n(lh) = 1$, принадлежит пространственно непрямому переходу. Это также подтверждается данными о природе экситона с легкой дыркой в КЯ $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ с $x < 0.2$, изложенными в работах [14,18].

На рис. 6, *a* приведено сопоставление экспериментального спектра отражения с расчетом в рамках модели диэлектрического отклика (1) в интервале энергий от 1512 до 1519.5 meV с использованием параметров, полученных в рамках микроскопического расчета. Параметры резонанса X1, полученные из микроскопического расчета и модели диэлектрического отклика, хорошо согласуются друг с другом. Для резонанса X2 величина радиационного затухания, полученная из микроскопического расчета, отличается от полученной с помощью модели диэлектрического отклика. Это объясняется близостью этого резонанса к области квазинепрерывного спектра. В этом случае амплитуда вклада состояния в спектр отражения определяется взаимным влиянием близкорасположенных резонансов [23–25]. Положение изолированного экситонного X_{LH1} резонанса легкой дыр-

ки и начало квазинепрерывного спектра экситонных состояний с легкой дыркой $LH_{\text{exc_cont}}$ отмечено стрелками.

Спектральные положения особенностей X3–X5 не соответствует резонансным частотам, экситонных состояний локализованных КЯ, полученным из микроскопического расчета. С другой стороны анализ показал, что узкая КЯ не вносит сильного возмущения в спектр экситонных состояний над квантовой ямой. Поэтому вклад спектра делокализованных экситонных состояний, в оптические свойства гетроструктуры можно оценить с помощью спектра поглощения, рассчитанного в формализме диэлектрической проницаемости с пространственной дисперсией. Расчет проводился для однородного слоя толщиной, соответствующей сумме ширины узкой КЯ и окружающих ее барьеров: $L^{BfL} + L^{QW1} + L^{Br} = 1232 \text{ nm}$ (рис. 6, *c*) с использованием двух значений Γ_{NR} . Малое значение $\Gamma_{NR} = 7.5 \mu\text{eV}$ (рис. 6, *c*, сплошная линия) позволяет наглядно представить структуру поляритонного спектра выше энергии 1515 meV. Второе значение $\Gamma_{NR} = 37.5 \mu\text{eV}$ выбиралось близким к значениям резонансов X3–X5 полученным из анализа экспериментального спектра (рис. 6, *c*, штриховая линия). В спектре поглощения можно выделить интервал, соответствующий квазинепрерывному экситонному спектру (от 1514.73 до 1515.5 meV), выше по энергии расположены максимумы, определяемые квантованием центра масс экситона в слое $L^{BfL} + L^{QW1} + L^{Br}$. Видно, что в области резонансов X3–X5 особенности расчетного спектра поглощения сохраняют значительную амплитуду даже при увеличении значения параметра нерадикационного затухания до значения $\Gamma_{NR} = 37.5 \mu\text{eV}$. Хорошее соответствие особенностей расчетного спектра поглощения и спектра отражения (рис. 6, *b, c*) позволяет сделать вывод, что поляритонная интерференция на слое гетроструктуры

$L^{BfL} + L^{QW1} + L^{Br}$ вносит существенный вклад в формирование спектра отражения данного образца в интервале энергий лежащим выше энергии 1515 meV.

7. Заключение

Таким образом, проанализирован вклад узкой КЯ в экситонный спектр гетероструктуры $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, выделены изолированные экситонные резонансы и определены их параметры. Установлено, что два экситонных резонанса находящихся ниже энергии свободного экситона в GaAs формируются экситоном с тяжелой дыркой, вклад экситона с легкой дыркой локализованного узкой КЯ располагается выше 1515 meV. Показано, что для моделирования экситонного спектра гетероструктур с узкой КЯ и малой концентрацией узкозонной компоненты подходит соотношение разрывов зон $E_c : E_v = 64 : 36$, полученное с применением теоретических значений материальных параметров, рассчитанных в рамках подхода модельного твердого тела (model-solid approach) [10].

Финансирование работы

Авторы (И.В. Игнатъев и А.В. Михайлов) благодарят Российский научный фонд за финансовую поддержку в рамках гранта № 19-72-20039-П при проведении эксперимента. Авторы (Н.Р. Григорьева и Е.С. Храмцов) благодарят Санкт-Петербургский государственный университет за финансовую поддержку в рамках грантов № 106788664 и № 9427165 при проведении теоретических расчетов.

Авторы благодарят Ресурсный центр „Наноконструирование фотоактивных материалов (Нанофотоника)“ СПбГУ за выращенные образцы

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] J.J. Coleman, P.K. York, K.J. Beernink. *Laser Diode Technology and Applications* **II**, 1219, 32 (1990).
- [2] П.В. Булаев, В.А. Капитонов, А.В. Лютецкий, А.А. Мармалок, Д.Б. Никитин, Д.Н. Николаев, А.А. Падалица, Н.А. Пихтин, А.Д. Бондарев, И.Д. Залевский, И.С. Тарасов. *ФТП* **36**, 1144 (2002).
- [3] Kwang Woong Kim, Jin Dong Song, Won Jun Choi, Jung I Lee. *J. Korean Phys. Soc.* **49**, 1169 (2006).
- [4] A. Stöhr, O. Humbach, S. Zumkley, G. Wingen, G. David, D. Jäger, B. Bollig, E.C. Larkins J.D. Ralston. *Opt. Quantum Electron.* **25**, S865 (1993).
- [5] S.W. Lee, K.U. Chu, S.W. Kim, S. Park, O'D. Kwon, K.W. Goossen, S.S. Pei. *Appl. Phys. Lett.* **64**, 3065 (1994).
- [6] L. Tinkler, P.M. Walker, E. Clarke, D.N. Krizhanovskii, F. Bastiman, M. Durska, M.S. Skolnick. *Appl. Phys. Lett.* **106**, 021109 (2015).
- [7] D. Ballarini, M. De Giorgi, E. Cancellieri, R. Houdré, E. Giacobino, R. Cingolani, A. Bramati, G. Gigli, D. Sanvitto. *Nature Commun* **4**, 1778 (2013).
- [8] T. Kuriakose, P.M. Walker, T. Dowling, O. Kyriienko, I.A. Shelykh, P. St-Jean. *Nature Photon.* **16**, 8, 566 (2022).
- [9] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус, *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*. Наука, М. (1972) 584 с.
- [10] Chris G. Van de Walle. *Phys Rev B* **39**, 3, 1871 (1989).
- [11] D.J. Arent, K. Deneffe, C. Van Hoof, J. De Boeck, G. Borghs. *J. Appl. Phys.* **66**, 1739 (1989).
- [12] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan. *J. Appl. Phys.* **89**, 5815 (2001).
- [13] K.W. Böer, U.W. Pohl. *Semiconductor Physics*. Springer Cham (2018). 1299 p.
- [14] А.В. Кавокин, С.И. Кохановский, А.И. Несвижский, М.Э. Сасин, Р.П. Сейсян, В.М. Устинов, А.Ю. Егоров, А.Е. Жуков, С.В. Гупалов. *ФТП* **31**, 1109 (1997).
- [15] S.V. Poltavtsev, Yu.P. Efimov, Yu.K. Dolgikh, S.A. Eliseev, V.V. Petrov, V.V. Ovsyankin. *Solid State Commun.* **199**, 4751 (2014).
- [16] E.S. Khramtsov, P.A. Belov, P.S. Grigoryev, I.V. Ignatiev, S.Yu. Verbin, Yu.P. Efimov, S.A. Eliseev, V.A. Lovtcius, V.V. Petrov, S.L. Yakovlev. *J. Appl. Phys.* **119**, 184301 (2016).
- [17] Л.Г. Гречиков, А.В. Субашиев, *ФТП* **27**, 446 (1993).
- [18] Р.П. Сейсян, А.В. Кавокин, Kh. Moumanis, М.Э. Сасин. *ФТТ* **59**, 1133 (2017).
- [19] Kyu-Seok Lee, El-Hang Lee. *ETRI J.* **17**, 13 (1996).
- [20] Kyu-Seok Lee, Chae-Deok Lee, Yongmin Kim, Sam Kyu Noh. *Solid State Commun.* **128**, 177 (2003).
- [21] R. Samti, F. Raouafi, M. Chaouach, M. Maaref, A. Sakri, J. Even, J.-M. Gerard, J.-M. Jancu. *Appl. Phys. Lett.* **101**, 012105 (2012).
- [22] E.L. Ivchenko. *Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures*. Alpha Science, Harrow (2005). 427 p.
- [23] М.М. Воронов, Е.Л. Ивченко, В.А. Кособукин, А.Н. Поддубный. *ФТТ* **49**, 9, 1709 (2007).
- [24] E.S. Khramtsov, P.S. Grigoryev, D.K. Loginov, I.V. Ignatiev, Yu.P. Efimov, S.A. Eliseev, P.Yu. Shapochkin, E.L. Ivchenko, M. Bayer. *Phys. Rev. B* **99**, 035431 (2019).
- [25] M.N. Bataev, M.A. Chukeev, M.M. Sharipova, P.A. Belov, P.S. Grigoryev, E.S. Khramtsov, I.V. Ignatiev, S.A. Eliseev, V.A. Lovtcius, Yu.P. Efimov. *Phys. Rev. B* **106**, 085407 (2022).
- [26] K. Muraki, S. Fukatsu, Y. Shiraki. *Appl. Phys. Lett.* **61**, 557 (1992).
- [27] В.А. Киселев, Б.В. Новиков, А.Е. Чередниченко. *Экситонная спектроскопия приповерхностной области полупроводников*. Изд-во С.-Петербургского ун-та, СПб. (2003) 244 с.
- [28] R. Del Solo, D'Andrea. *Optical Switching in Low-dimensional Systems*. Plenum Publishing Corporation (1989). 289 p.
- [29] Д.К. Логинов, Е.В. Убийвовк, Ю.П. Ефимов, В.В. Петров, С.А. Елисеев, Ю.К. Долгих, И.В. Игнатъев, В.П. Кочерешко, А.В. Селькин, *ФТТ* **48**, 11, 1979 (2006).
- [30] А.Б. Певцов, С.А. Пермогоров, А.В. Селькин, Н.Н. Сырбу, А.Г. Уманец, *ФТП* **16**, 8, 1399 (1982).
- [31] Н.Н. Ахметдиев. *ЖЭТФ* **79**, 1534 (1980).
- [32] Xing-Fei He. *Phys Rev B* **43**, 3, 2063 (1991).

Редактор Т.Н. Василевская