

КОЕФІЦІЄНТ ПОГЛИНАННЯ СВІТЛА, ЗУМОВЛЕНИЙ МІЖПІДЗОННИМИ ПЕРЕХОДАМИ ЕЛЕКТРОНІВ У НАДГРАТКАХ СФЕРИЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧОК

В. І. Бойчук, І. В. Білінський, Р. І. Пазюк

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, кафедра теоретичної фізики, вул. Івана Франка, 24, Дрогобич, 82100, Україна

(Отримано 30 травня 2014 р.; в остаточному вигляді — 12 березня 2015 р.)

У роботі досліджено 3D-надґратку сферичних квантових точок (КТ) кристала GaAs у матриці $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0.2, \dots, 1.0$). У наближенні сильного зв'язку отримано і проаналізовано закони дисперсії електронів. Детально обчислено залежність $E = E(\mathbf{k})$ для $1s$ - та трьох $1p$ -підзон для різних радіусів КТ та концентрацій Al у матриці $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Проаналізовано залежності густини електронних станів від енергії в досліджуваних підзонах. Показано, що густина станів як функція енергії суттєво залежить від розміру КТ, відстаней між КТ та концентрації x .

Отримано формулу для коефіцієнта поглинання при прямих міжпідзонних переходах, який виражається через квадрат матричного елемента електронного переходу та комбінованої густини станів. Обчислення показали, що в дипольному наближенні електронні переходи дозволені між $1s$ - та $1p_2$ -підзонами. Коефіцієнт поглинання як функція частоти електромагнітної хвилі характеризується двома максимумами, що відповідають переходам електронів з хвильовими векторами в центрі та на краю зони Брілюена.

Ключові слова: квантова точка, надґратка, електронні стани, густина станів, коефіцієнт поглинання.

PACS number(s): 68.65.Cd, 73.20.At, 78.67.Pt, 79.60.jv

ВСТУП

Дослідження у фізиці надґраток із квантовими ямами та їх прикладне застосування залучило багатьох дослідників до вивчення систем, що мають меншу вимірність — надґраток квантових дротів та надґраток квантових точок. Останніми роками експериментатори розробили й тепер активно розвивають методи вирощування великих упорядкованих масивів квантових точок [1].

Перші методи створення масиву квантових точок (селективне травлення структур із квантовими ямами [2], ріст на профільованих підкладках чи сколах [3], конденсація у скляних матрицях [4]) приводили до неоднорідних масивів та значної дисперсії за розмірами. Використання методу молекулярно-променевої епітаксії та ефектів самоорганізації напівпровідникових наноструктур у гетероепітаксійних напівпровідникових системах [5–7] сприяло поліпшенню характеристик наносистем.

Режим росту квантових точок (КТ), згідно з механізмом Странського–Крастанова дав змогу отримати тривимірні когерентно-напружені острівці [8–10]. Проте одержані масиви були ще досить неоднорідними як за розмірами, так і за розташуванням. Автори праці [11] виростили масив КТ InAs на підкладці GaAs з незначною дисперсією за розмірами КТ і показали, що утворюється періодична структура КТ вздовж певного напрямку.

Були вирощені багатошарові масиви КТ, у яких квантові точки розташовані одна над одною. Вони описані у працях [12–15]. Такі впорядковані масиви

назвали надґратками вертикально зв'язаних КТ. У них відстань між сусідніми КТ одного шару набагато перевищує розміри КТ і відстань між найближчими шарами.

Методом упровадження КТ у пори металу чи полімерної плівки, які мають ідеальну необхідну форму, автори праць [16,17] домоглися надзвичайно вузького розподілу за розмірами КТ та їх високого ступеня впорядкованості. Такий підхід, зокрема, можна використати для створення багатошарових надґраток сферичних квантових точок.

Переважає більшість теоретичних досліджень стосуються масиву “невзаємодіючих” КТ. Відстані між КТ набагато перевищують розміри самих КТ. Тому досліджують спектр квазічастинок окремого елемента масиву КТ. Що ж до теорії енергетичних спектрів основних квазічастинок (електронів, дірок, екситонів) у масивах періодично розташованих тунельно зв'язаних КТ, то таких теоретичних робіт є надзвичайно мало.

У праці [18] досліджено спектр електронів у надґратці КТ еліптичного квантового дроту (КД) на основі напівпровідника GaAs в матриці $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Масив вертикально зв'язаних КТ з анізотропною ефективною масою носіїв заряду був апроксимований моделлю надґратки квантових точок, які розташовані в середовищі вздовж еліптичного квантового дроту. У результаті чисельних розрахунків показано, що енергетичний спектр електрона в надґратках із КТ вздовж еліптичного квантового дроту є чергуванням парних і непарних дозволених і заборонених міні-зон енергій. Положення та кількість міні-зон визначаю-

ться розмірами КТ, а ширина дозволених міні-зон — товщиною й висотою потенціальних бар'єрів. Квазі-частинка в кожній із зон характеризується своєю величиною ефективної маси, яка також залежить від еліптичності квантового доту.

Дослідження електронної структури масиву тунельно зв'язаних у всіх трьох вимірах квантових точок проведено в циклі праць [19–23] для гетероструктур GaN/AlN та InAs/GaAs. При цьому методом теорії збурень враховували внутрішні пружні напруги в масиві КТ й ефекти п'єзоелектричної та спонтанної поляризації. Основним недоліком цього методу є його погана збіжність ряду теорії збурень. Щоб покращити збіжність, у наступних працях [24–28] запропоновано модифікований метод приєднаних плоских хвиль, який коректно враховує складну поведінку хвильових функцій квазічастинок у надґратках. Цим методом досліджено електронні та екситонні стани та їх залежність від геометричних параметрів надґраток циліндричних напівпровідникових КТ β -HgS у матриці β -CdS та GaAs у матриці $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Спектр електронів і дірок в одновимірних та двовимірних надґратках (НГ) сферичних КТ отримано і проаналізовано у працях [29–32].

У запропонованій статті теоретично обчислено електронну зонну структуру тривимірної надґратки GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ з рівномірно розподіленими тунельно зв'язаними сферичними КТ. Досліджено також оптичні властивості надґраток КТ. Зокрема, обчислено ймовірності міжпідзонних електронних переходів та густини станів основного й перших збуджених станів електрона НГ для різних радіусів КТ та відстаней між ними. Отримані обчислення дали змогу дослідити залежність коефіцієнта міжпідзонного поглинання гетеросистем GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0.2, \dots, 1.0$) з періодично розташованими квантовими точками від частоти падаючого світла.

І. ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ТА ХВИЛЬОВІ ФУНКЦІЇ ЕЛЕКТРОНА НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СФЕРИЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧОК

Розрахуймо електронну зонну структуру надґратки сферичних напівпровідникових квантових точок, розташованих у матриці. Для цього розглянемо надґратку напівпровідникових сферичних квантових точок (НСКТ), яка характеризується елементарною коміркою у вигляді прямокутної призми (рис. 1). Будемо вважати, що відомі всі геометричні параметри системи НСКТ: радіус КТ — R , відстані між центрами КТ — $|\mathbf{a}_i|$, $i = 1, 2, 3$. Розраховуючи спектр електрона, використаємо наближення ефективних мас, яке справедливе при не дуже малих радіусах КТ ($R > 2\text{ нм}$) [33]. За таких умов ефективні маси електрона в КТ і в матриці (m_1, m_2) є відомими і такими, як у відповідних масивних кристалах. Будемо розглядати такі гетеросистеми, для яких сталі ґратки та діелектричні проникності обох кристалів, з яких вони складаються,

є дуже близькими за величинами. Тоді деформаційними та поляризаційними ефектами на межі поділу середовищ можна знехтувати або врахувати за теорією збурень [29].

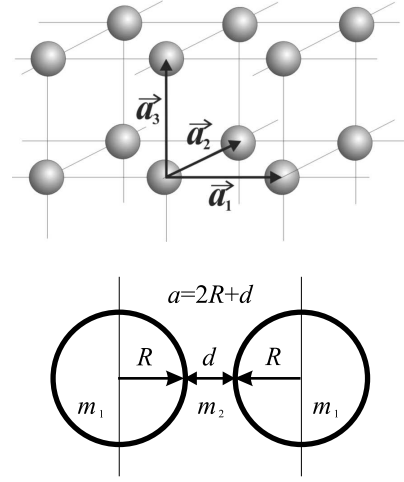


Рис. 1. Геометрична схема НСКТ, плоский характерний перетин сусідніх КТ.

Для розрахунку спектра електрона в гетероструктурі використаємо наближення ступінчатого потенціалу. Також будемо вважати, що ефективна маса електрона змінює своє значення на межі поділу в дуже малій області зміни координат. Тому потенціальна енергія та маса електрона такі:

$$V(r) = \begin{cases} -U_0, & r \leq R, \\ 0, & r > R, \end{cases} \quad U_0 > 0, \quad m(r) = \begin{cases} m_1, & r \leq R, \\ m_2, & r > R, \end{cases}$$

де r — відстань електрона від центра КТ.

Рівняння Шредингера електрона сферичної КТ розв'язуємо точно. Хвильові функції станів частинки отримуємо у вигляді [24]:

$$\phi_\nu(\mathbf{r}) = \begin{cases} A j_l(kr), & r \leq R \\ B h_l^{(1)}(\kappa r), & r > R \end{cases} \cdot Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (1)$$

де $k = \sqrt{\frac{2m_1(U_0 + |E_\nu^0|)}{\hbar^2}}$, $\kappa = \sqrt{\frac{2m_2 E_\nu^0}{\hbar^2}}$, $-U_0 < E_\nu^0 < 0$, $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — сферична функція, $j_l(x)$, $h_l^{(1)}(x)$ — функції Бесселя і Ганкеля відповідно. З умов “зшивання” хвильової функції, які враховують неперервність хвильової функції та потоку ймовірності, можна визначити енергію квантових станів електрона в КТ:

$$\begin{vmatrix} j_l(kR) & -h_l^{(1)}(\kappa R) \\ \frac{1}{m_1} j_l'(kR) & -\frac{1}{m_2} h_l^{(1)'}(\kappa R) \end{vmatrix} = 0.$$

Для того, щоб знайти енергетичний спектр і хвильові функції електрона НСКТ, необхідно розв'язати рівняння Шредингера з гамільтоніаном:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m(r)} \nabla + U(\mathbf{r}), \quad (2)$$

де $U(\mathbf{r})$ — періодичний потенціал надґратки. Через близькість основних параметрів кристалів гетероструктури (сталих ґратки, діелектричних проникностей) виберімо потенціал $U(\mathbf{r})$ у вигляді суми потенціалів квантових точок:

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{n}} V(\mathbf{r} - \mathbf{n}), \quad (2')$$

де $\mathbf{n} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$, $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

Хвильова функція електрона $\psi(\mathbf{r})$ повинна задовольняти трансляційну умову: $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{n}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{n}}\psi(\mathbf{r})$. Будемо цікавитися підбар'єрними енергетичними зонами надґратки — підзонами, енергія яких значно менша за висоту бар'єра на межі квантова точка — матриця. Скористаймося наближенням сильного зв'язку, і хвильову функцію $\psi(\mathbf{r})$ запишімо так:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{n}, \nu} C_{\nu} e^{i\mathbf{k}\mathbf{n}} \phi_{\nu}(\mathbf{r} - \mathbf{n}), \quad (3)$$

де $\phi_{\nu}(\mathbf{r})$ — власна функція оператора енергії електрона КТ (1).

Стационарне рівняння Шрединґера для електрона в НСКТ з гамільтоніаном (2) за умови (3) набуде вигляду:

$$\hat{H} \sum_{\mathbf{n}, \nu} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} C_{\nu} \phi_{\nu}(\mathbf{r} - \mathbf{n}) = E \sum_{\mathbf{n}, \nu} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} C_{\nu} \phi_{\nu}(\mathbf{r} - \mathbf{n}). \quad (4)$$

Домножмо рівняння (4) на $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{n}'} \phi_{\nu'}^*(\mathbf{r} - \mathbf{n}')$ та проінтегруймо його за координатами. У наближенні найближчих сусідів отримаємо систему лінійних однорідних рівнянь:

$$\sum_{\nu} C_{\nu} \left[(E_{\nu}^0 - E) \left(\delta_{\nu\nu'} + 2 \sum_{i=1}^3 A_{\nu\nu'}^i \cos(k_i a_i) \right) + 2 \sum_{i=1}^3 [B_{\nu\nu'}^i + P_{\nu\nu'}^i \cos(k_i a_i)] \right] = 0, \quad (5)$$

де для зручності введено такі позначення:

$$A_{\nu\nu'}^i = \int \phi_{\nu'}^*(\mathbf{r} - \mathbf{a}_i) \phi_{\nu}(\mathbf{r}) d\mathbf{r},$$

$$B_{\nu\nu'}^i = \int \phi_{\nu'}^*(\mathbf{r}) V(|\mathbf{r} - \mathbf{a}_i|) \phi_{\nu}(\mathbf{r}) d\mathbf{r},$$

$$P_{\nu\nu'}^i = \int \phi_{\nu'}^*(\mathbf{r} - \mathbf{a}_i) V(|\mathbf{r} - \mathbf{a}_i|) \phi_{\nu}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (6)$$

Прирівнявши визначник системи рівнянь (5) до нуля, отримаємо енергію електрона в надґратці квантових точок.

Запропонований підхід можна застосувати для широкого класу НСКТ з напівпровідників, сталі ґраток та діелектричні проникності яких незначно відрізняються. Цю теорію, зокрема, можна використати як для гетероструктур напівпровідників групи A_3B_5 , так і для A_2B_6 .

II. ЕНЕРГІЇ ЕЛЕКТРОНІВ НСКТ

Розглянемо надґратку квантових точок кубічної симетрії, для якої основні трансляційні вектори $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ однакові за модулем: $a_1 = a_2 = a_3 \equiv a$. Конкретні обчислення проведено для гетеросистеми GaAs/Al_xGa_{1-x}As, основні фізичні величини якої залежать від концентрації x алюмінію [34, 35]. Так, ефективна маса електрона напівпровідникового середовища Al_xGa_{1-x}As визначається співвідношенням:

$$m_2 = (m_1 + 0.083x)m_0. \quad (7)$$

Тут $m_1 = 0.0665 m_0$ — ефективна маса електрона у середовищі GaAs, m_0 — маса вільного електрона у вакуумі. Енергія розриву зони провідності кристала КТ GaAs відносно матриці Al_xGa_{1-x}As $U_0 = 0.57 (1.155x + 0.37x^2)$ еВ.

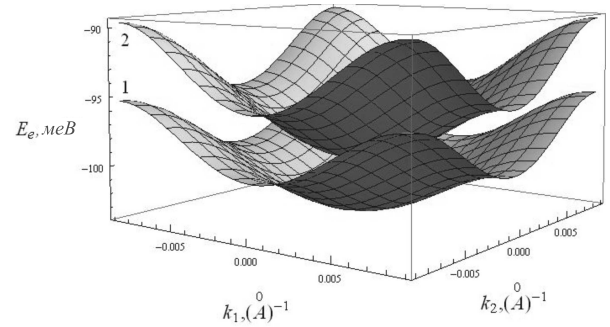


Рис. 2. Залежність енергії основного стану електрона НСКТ GaAs/Al_{0.2}Ga_{0.8}As від двовимірного хвильового вектора \mathbf{k} ($k_1, k_2, k_3 = 0$) (поверхня 1 відповідає випадку $k_3 = 0$, поверхня 2 — $k_3 = \frac{\pi}{a}$, a — стала НСКТ).

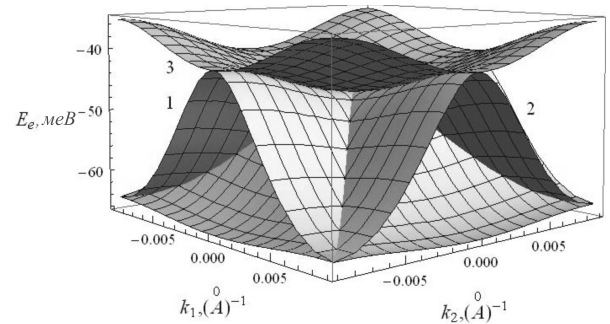


Рис. 3. Залежність енергії перших збуджених станів p -типу електрона системи GaAs/Al_{0.2}Ga_{0.8}As від двовимірного хвильового вектора \mathbf{k} ($k_1, k_2, k_3 = 0$).

Після числових розрахунків отримуємо залежності енергій основного (рис. 2) та перших збуджених (рис. 3) станів (s -, p -підзон) електрона НСКТ від хвильового вектора \mathbf{k} при радіусі квантової точки $R = 90 \text{ \AA}$ та відстані між межами поділу сусідніх КТ $d = 6 \text{ \AA}$ в надґратці GaAs/Al_{0.2}Ga_{0.8}As. Для основної підзони функції $E = E(k_1, k_2, k_3 = \text{const})$ є монотонно

зростаючими функціями за умови збільшення k_1, k_2 , а при $k_1, k_2 = 0$ отримуємо мінімум енергії. Подібно поводить себе й перший збуджений стан p_z -типу (поверхня 3, рис. 3). Кожна з поверхонь $E = E(k_1, k_2, 0)$, яка відповідає станам p_x і p_y (поверхні 1,2 на рис.3), збігається з іншою при повороті на 90° в k -просторі навколо осі абсцис. Обчислення енергії p -міні-зон показали, що незалежно від симетрії хвильової функції зміна k_3 в області зони Бріллюена веде до зміни положення поверхонь в однакових межах. Отже, проведений аналіз показує, що ширина підзон однакова для різних станів (p_x, p_y, p_z), незважаючи на різні закони дисперсії електронів у підзонах.

Досі ми аналізували електронний енергетичний спектр надгратки GaAs/Al_{0.2}Ga_{0.8}As. Дослідимо вплив зміни концентрації Al на ширину s -подібної підзони електрона у квантовій точці GaAs. Із рис. 4 видно, що $\Delta E = \Delta E(R)$ є монотонно спадною функцією від R . За різних концентрацій Al маємо різну швидкість зміни ширини міні-зони при зміні розмірів КТ. Обчислення показали також, що зі зменшенням періоду надгратки збільшується ширина енергетичних зон і відбувається їх зсув у високоенергетичну область. Отримані результати можна пояснити збільшенням перекриття хвильових функцій електронів, що перебувають у сусідніх квантових точках.

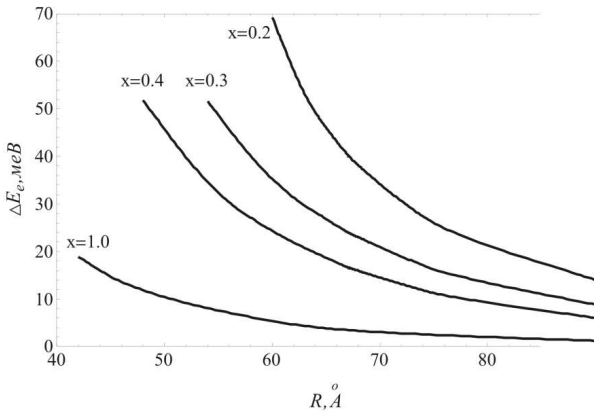


Рис. 4. Залежність ширини s -підзони електрона від радіуса КТ GaAs/Al_xGa_{1-x}As при $d = 6$ Å та різних значеннях $x = 0.2, 0.3, 0.4, 1.0$.

Закони дисперсії $1s$ - та $1p$ -підзон отримані з системи рівнянь (5), яка, своєю чергою, одержана за умови нехтування впливом станів неперервного спектра на досліджувані стани. Для оцінки величин радіусів КТ, при яких можна зробити зазначене наближення, розглянемо рівняння Шредингера з гамільтоніаном (2):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \frac{1}{m(r)} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{n} \neq 0} V(\mathbf{r} - \mathbf{n}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}).$$

Перші два доданки є гамільтоніаном електрона в КТ, а третій будемо вважати малим збуренням. Друга поправка для енергії $1p_z$ -стану зумовлена впливом ста-

нів неперервного спектра

$$E^{(2)} = - \int \frac{|W_{1p_z, \mathbf{k}}|^2}{|E_{1p}^0| + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}} d^3 k,$$

де

$$W_{1p_z, \mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \int \phi_{1p_z}(\mathbf{r}) V(\mathbf{r} - \mathbf{n}) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3 r, m_e = \sqrt{m_1 m_2}.$$

Результати обчислень електронних станів гетеросистеми GaAs/AlAs подано в табл. 1. З порівняння енергій рівнів незбуреної задачі та величин поправок до енергії $E^{(2)}$ видно, що для $R > 25$ Å можна знехтувати впливом станів з неперервним спектром на підбар'єрні стани електрона в надгратці. Тому в роботі розглядають надгратки з $R \geq 30$ Å.

$R, \text{Å}$	E_{1s}^0, meV	$E_{1p_z}^0, \text{meV}$	$E^{(2)}$
21.7	-471.15	-9.94	-27.64
25	-552.21	-135.72	-4.91
30	-642.91	-306.23	-0.81
40	-754.64	-530.80	-0.08
60	-856.54	-739.61	-0.005

Таблиця 1.

III. ГУСТИНА ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ ТА КОЕФІЦІЄНТ МІЖПІДЗОННОГО ПОГЛИНАННЯ СВІТЛА НСКТ

Якщо на надграткову систему КТ падає монохроматична електромагнітна хвиля, поляризація якої задається вектором ξ , що характеризується векторним потенціалом

$$\mathbf{A} = -\frac{ic}{\omega} \xi A_0 e^{i(\chi\mathbf{r} - \omega t)},$$

то взаємодія електромагнітної хвилі з електроном задається оператором

$$\widehat{H}' = \frac{e\hbar}{m_0\omega} e^{i(\chi\mathbf{r} - \omega t)} A_0 (\xi, \nabla),$$

де A_0 — амплітуда векторного потенціалу, χ, ω — хвильовий вектор та частота хвилі.

Імовірність переходу електрона з підзони ν в підзону ν' визначає фактично спостережуваний на досліді коефіцієнт поглинання, який визначається різницею енергії поглинутого та випроміненого світла [36]

$$\alpha = \frac{2(2\pi e\hbar)^2}{V m_0^2 \omega c \sqrt{\epsilon_1}} \times \sum_{\nu, \nu'} |(\xi, \mathbf{J}_{\nu\nu'})|^2 (f(\nu) - f(\nu')) \delta(E_{\nu'} - E_\nu - \hbar\omega), \quad (8)$$

$\mathbf{J}_{\nu\nu'} = \int \psi_{\nu'}^* e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \nabla \psi_{\nu} d^3r$ — матричний елемент квантового переходу електрона зі стану ν у стан ν' , $f(\nu), f(\nu')$ — функції розподілу електронів у відповідних підзонах.

Дослідимо поглинання світла для прямих електронних переходів. Матричний елемент такого електронного переходу з $1s$ - в $1p$ -підзону в дипольному наближенні ($\chi a \ll 1$)

$$\mathbf{J}_{1s;1p}(\mathbf{k}) = a_{1p}^* a_{1s} \left\{ \int \phi_{1p}^{0*}(\mathbf{r}) \nabla \phi_{1s}^0(\mathbf{r}) d^3r + \sum_{\mathbf{n}_0} e^{i\mathbf{k}\mathbf{n}_0} \int \phi_{1p}^{0*}(\mathbf{r} + \mathbf{n}_0) \nabla \phi_{1s}^0(\mathbf{r}) d^3r \right\}, \quad (9)$$

де

$$a_{\{1s\}} = \left(1 + \sum_{\mathbf{n}_0} e^{i\mathbf{k}\mathbf{n}_0} \int \phi_{\{1s\}}^{0*}(\mathbf{r} + \mathbf{n}_0) \phi_{\{1s\}}^0(\mathbf{r}) d^3r \right)^{-\frac{1}{2}},$$

\mathbf{n}_0 — вектори трансляції сусідніх (із нульовою) квантових точок ($\mathbf{n}_0 = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, n_i = \pm 1, i = 1, 2, 3$).

Нехай світло лінійно поляризоване вздовж осі Oz . Обчислення показали, що в дипольному наближенні переходи електрона дозволені лише між $1s$ - та $1p_z$ -підзонами. Отже, $|\xi \mathbf{J}_{1s,1p}|^2 = |J_{1s,1p_z}^z|^2$. Квадрат матричного елемента $|J_{1s,1p_z}^z(\mathbf{k})|^2$ для різних величин хвильового вектора в НГКТ GaAs/AlAs є плавною функцією і приймає максимальне значення при $\mathbf{k} = 0$ (рис. 5). Із рисунка видно, що зміна $|J_{1s,1p_z}^z(\mathbf{k})|^2$ невелика в усій області визначення. Зокрема,

$$\frac{|J_{1s,1p_z}^z(0)|^2 - |J_{1s,1p_z}^z(\frac{\pi}{a})|^2}{J_{1s,1p_z}^z(0)} = \begin{cases} 0.19, & R = 40 \text{ \AA} \\ 0.08, & R = 60 \text{ \AA}. \end{cases}$$

Цей результат дає змогу в рівнянні (8) вважати $|J_{1s,1p_z}^z(\mathbf{k})|^2$ слабозмінною величиною. Тоді у формулі для коефіцієнта міжпідзонного поглинання лінійно поляризованого світла величину $|J_{1s,1p_z}^z(\mathbf{k})|^2$ можна винести з-під знака суми (інтеграла) в деякій середній точці зони Бріллюена. Отримаємо, що

$$\alpha(\omega) = \frac{2(2\pi e\hbar)^2}{V m_0^2 \omega c \sqrt{\varepsilon_1}} |J^z(\mathbf{k}_c)|^2 \times \sum_{\mathbf{k}} (f_{1s} - f_{1p_z}) \delta(E_{1p_z}(\mathbf{k}) - E_{1s}(\mathbf{k}) - \hbar\omega). \quad (10)$$

Розгляньмо випадок, коли $1s$ -підзона заповнена, а $1p_z$ -підзона вільна, тобто $f_{1s} = 1$, а $f_{1p_z} = 0$.

Обчислюючи коефіцієнт поглинання, необхідно у формулі (10) перейти від суми до інтеграла за хвильовим вектором згідно з правилом:

$$\sum_{\mathbf{k}} \dots = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \dots,$$

а потім інтегрування за \mathbf{k} замінити інтегруванням за енергією, увівши комбіновану густину станів:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \delta(E_{1p,0}(\mathbf{k}) - E_{1s}(\mathbf{k}) - \hbar\omega) \\ &= \int dE \rho(\tilde{E}) \delta(\tilde{E} - \hbar\omega) = \rho(\hbar\omega). \end{aligned}$$

Отже,

$$\alpha(\omega) = \frac{2(2\pi e\hbar)^2}{m_0^2 \omega c \sqrt{\varepsilon_1}} |J^z(\mathbf{k}_c)|^2 \rho(\hbar\omega). \quad (10')$$

Відомо [36], що комбінована густина станів,

$$\rho(\tilde{E}) = \frac{1}{8\pi^3} \oint \frac{dS}{|\text{grad}_{\mathbf{k}} \tilde{E}(\mathbf{k})|}, \quad (11)$$

де $\tilde{E}(\mathbf{k}) = E_{1p,m}(\mathbf{k}) - E_{1s}(\mathbf{k})$, а dS — елемент ізоенергетичної поверхні $\tilde{E}(\mathbf{k}) = \text{const}$. Якщо цю поверхню задати рівнянням $k_3 = \varepsilon_1(k_1, k_2)$, де $\varepsilon_1(k_1, k_2)$ — диференційована функція в області $D(k_1, k_2)$, то поверхневий інтеграл обчислюємо за формулою [37]:

$$\begin{aligned} \rho(\tilde{E}) &\equiv \frac{1}{(2\pi)^3} \\ &\times \iint_{D(k_1, k_2)} \frac{dk_1 dk_2 \sqrt{1 + \left(\frac{\partial \varepsilon_1(k_1, k_2)}{\partial k_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial \varepsilon_1(k_1, k_2)}{\partial k_2}\right)^2}}{|\text{grad } \tilde{E}(k_1, k_2, \varepsilon_1(k_1, k_2))|}. \end{aligned} \quad (12)$$

Перш ніж приступити до обчислення коефіцієнта міжпідзонного поглинання світла при переході електронів з $1s$ - в $1p_z$ -підзону, проаналізуємо детально залежності $\rho = \rho(E)$ для всіх розглядуваних підзон зокрема.

Дослідження густини станів у підзонах вимагає вивчення особливих точок зони Бріллюена. Щоб обчислити відповідні поверхневі інтеграли типу (11), необхідно звести їх до кратних інтегралів зі змінними ме-

жами інтегрування. Інтеграл виду (12) для однієї підзони є гладкою функцією при всіх значеннях k_1, k_2 , крім тих, коли знаменник дорівнює нулеві:

$$|\text{grad } E(k_1, k_2, \varepsilon_1(k_1, k_2))| = 0. \quad (13)$$

Якщо виконується умова (13), то інтеграл має особливості. Це так звані критичні точки Ван-Гова першого та другого роду.

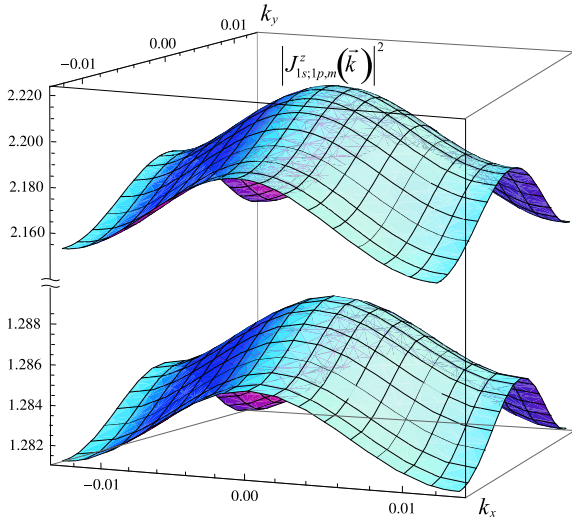


Рис. 5. Залежність квадрата матричного елемента $|J_{1s,1p_z}^z(\mathbf{k})|^2$ від хвильового вектора $\mathbf{k}(k_1, k_2, 0)$ для різних радіусів КТ: 1 – $R = 60 \text{ \AA}$, 2 – $R = 40 \text{ \AA}$.

Залежність густини електронних станів зазначених підзон в НСКТ GaAs/AlAs від енергії для різних радіусів КТ зображена на рис. 6. Криві 1,2,3 відповідають функціям $\rho = \rho(E)$ для НСКТ з різними величинами радіусів квантових точок: $R = 60 \text{ \AA}$, 45 \AA , 35 \AA за умови, що відстань між КТ дорівнює 6 \AA , що відповідає сталій ґратки кристала GaAs. Залежність, що подана кривою 4 на рис. 6,а, відповідає $\rho = \rho(E)$, за умови знехтування інтегралами перекриття хвильових функцій електрона сусідніх КТ. Таке наближення використовують у зонній теорії сильного зв'язку кристалів [36].

Із рисунка видно, що зі зменшення розмірів КТ ширина підзон та область енергій, де $\rho(E) \neq 0$, суттєво збільшується з одночасним зсувом у високоенергетичну область та зменшенням максимумів густини станів. Причому зменшення розмірів КТ веде до збільшення порушення симетрії кривої 3 порівняно з 4 (штрихова крива) в залежності $\rho(E)$. Це зрозуміло з фізичних міркувань, бо зменшення розмірів КТ веде до зростання енергії електронів, що й полегшує тунелювання в матрицю, а отже і зростання інтеграла перекриття хвильових функцій. Обчислення показали, що, незважаючи на особливості, $\rho(E)$ залишається скінченним. Критичні точки першого роду є чотирьох типів: особлива точка типу M_0 (мінімум), M_3 (максимум) та сідловидні точки M_1, M_2 . Критичні точки необхідно знати, досліджуючи структури підзон. Справді, поблизу них густина станів змінюється

найшвидше, а в області між ними функції густин станів гладкі. Між критичними точками M_2 та M_1' виникає плато. Це, однак, є характерною рисою лише $1p$ -підзон, бо в $1s$ -підзонах плато відсутнє.

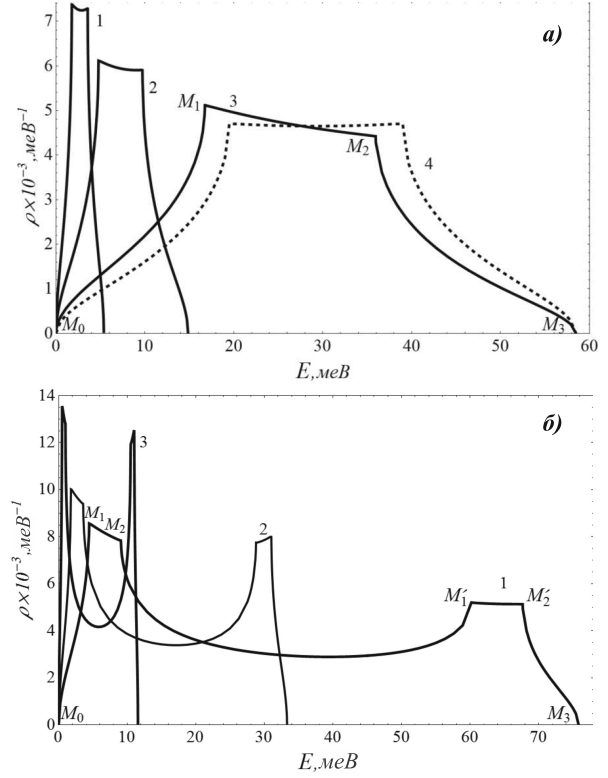


Рис. 6. Залежність сумарної густини станів $1s$ -підзон (рис. 6,а) та $1p$ -підзон (рис. 6,б) електронів в НСКТ GaAs/AlAs від енергії для різних радіусів КТ: 1 – $R = 60 \text{ \AA}$, 2 – $R = 45 \text{ \AA}$, 3 – $R = 35 \text{ \AA}$.

Дослідімо тепер, як впливають на форму та величину густини станів $\rho(E)$ основні параметри досліджуваних систем. Із цією метою обчислено та зображено на рис. 7 залежність густини станів $1s$ -підзони від енергії при $R = 60 \text{ \AA}$ для різного типу структури: 1 – GaAs/AlAs, 2 – GaAs/Al_{0.4}Ga_{0.6}As, 3 – GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As, 4 – GaAs/Al_{0.2}Ga_{0.8}As. Як було сказано вище, кожна зі структур характеризується різними матеріальними параметрами, а саме, ефективними масами та висотами потенціального бар'єра. З рисунка видно, що зменшення концентрації алюмінію (зменшення висоти потенціального бар'єра) приводить до збільшення ширини зони та зменшення максимальних значень густини станів та порушення симетрії кривих густини станів.

Формули (10), (10') дають змогу обчислити коефіцієнт поглинання при міжпідзонних переходах з $1s$ - в $1p$ -підзону електрона. При цьому необхідно обчислити комбіновану густина станів (11). Особливістю обчислень комбінованої густини станів є наявність критичних точок другого роду:

$$\text{grad}_{\mathbf{k}} E_{1s}(\mathbf{k}) = \text{grad}_{\mathbf{k}} E_{1p_z}(\mathbf{k}) \neq 0. \quad (14)$$

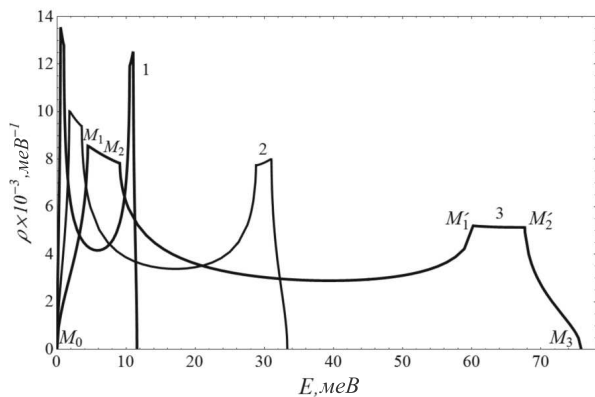


Рис. 7. Залежність $\rho = \rho(E)$ для 1s-підзони при $R = 60 \text{ \AA}$, $d = 6 \text{ \AA}$ для різного типу структур: 1 — GaAs/AlAs, 2 — GaAs/Al_{0.4}Ga_{0.6}As, 3 — GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As, 4 — GaAs/Al_{0.2}Ga_{0.8}As.

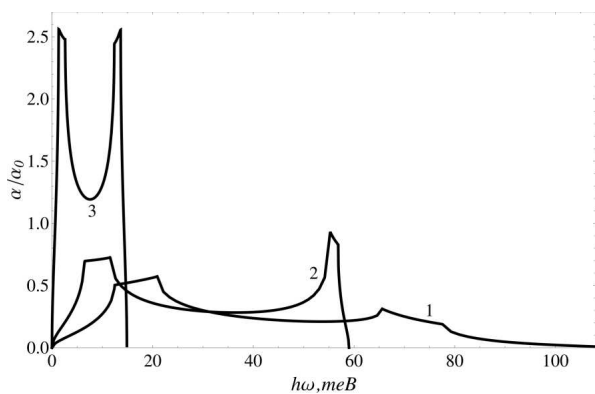


Рис. 8a. Коефіцієнт міжпідзонного поглинання світла для НСКТ GaAs/Al_xGa_{1-x}As з $R = 60 \text{ \AA}$ при різних значеннях x : 1 — $x = 0,3$; 2 — $x = 0,4$; 3 — $x = 1,0$.

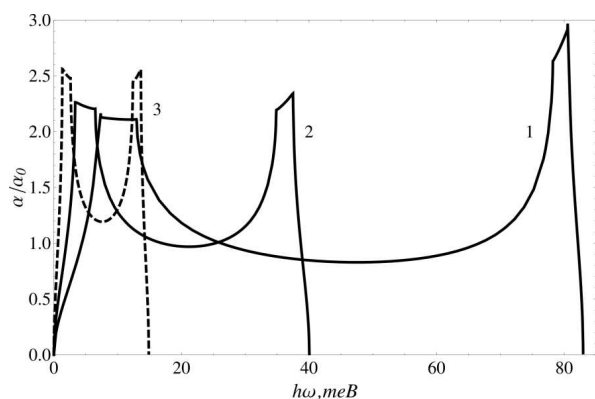


Рис. 8b. Коефіцієнт міжпідзонного поглинання світла для НСКТ GaAs/AlAs для різних радіусів КТ: 1 — $R = 35 \text{ \AA}$, 2 — $R = 45 \text{ \AA}$, 3 — $R = 60 \text{ \AA}$.

Енергія електрона є парною функцією хвильового вектора, а отже, градієнт $\text{grad}_{\mathbf{k}} E_{1s}(\mathbf{k})$ та $\text{grad}_{\mathbf{k}} E_{1p}(\mathbf{k})$ будуть непарними функціями. Тому, якщо в центрі зони Бріллюена енергетичні зони не вироджені, то там є критична точка першого роду. Умова (14) може ви-

конуватися при довільних значеннях \mathbf{k} і залежить від явного вигляду законів дисперсії $E_{1s}(\mathbf{k})$ та $E_{1p_z}(\mathbf{k})$. Через це критичні точки другого роду трапляються частіше, ніж першого.

На рис. 8,а подано залежність безрозмірного коефіцієнта міжзонного поглинання світла при прямих електронних переходах від енергії фотона для радіуса КТ $R = 60 \text{ \AA}$ різних типів НСКТ: 1 — GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As, 2 — GaAs/Al_{0.4}Ga_{0.6}As, 3 — GaAs/AlAs. Видно, що зменшення концентрації алюмінію спричиняє збільшення максимумів та зменшення симетрії кривих $\alpha = \alpha(\omega)$. На рис. 8,б подано залежність $\alpha = \alpha(\omega)$ для НСКТ GaAs/AlAs при різних радіусах КТ. Видно, що для цих надґраток коефіцієнт поглинання характеризується двома яскраво вираженими максимумами, відстань між якими зменшується зі збільшенням радіуса КТ.

IV. ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

У запропонованій статті досліджено тривимірну надґратку сферичних квантових точок кристала GaAs у матриці Al_xGa_{1-x}As ($x = 0.2, \dots, 1.0$). У межах наближення сильного зв'язку отримано і проаналізовано закони дисперсії електронів розглядаваної надґраткової системи, який є рядом підзон. Детально обчислено залежність $E = E(\mathbf{k})$ для 1s- та трьох (p_x, p_y, p_z) підзон більших енергій для різних радіусів КТ та концентрацій Al у матриці Al_xGa_{1-x}As.

Зважаючи на те, що в надґратках відстань між 1s- та 1p-підзонами дорівнює декілька десятків меВ, при низьких температурах їх можна експериментально виділити. Тому значна частина роботи стосувалася визначення залежності густини електронних станів від енергії в зазначених підзонах. Із цією метою встановлено для кожної підзони особливі точки Ван-Хова й показано, що густина станів як функція енергії суттєво залежить від розміру КТ, відстаней між КТ та концентрації Al, яка веде до зміни висоти потенціального бар'єра.

У завершальній частині роботи розглянуто випадок, коли 1s-підзона повністю заповнена й гетеросистема взаємодіє з лінійно поляризованою електромагнітною хвилею, енергія фотонів якої близька до відстані між 1s- та 1p-підзонами. Коефіцієнт поглинання для прямих міжпідзонних переходів виражається через квадрат матричного елемента електронного переходу та комбінованої густини станів. Обчислення показали, що в дипольному наближенні електронні переходи дозволені між 1s- та 1p_z-підзонами. Коефіцієнт поглинання характеризується двома максимумами, що відповідають переходам електронів з хвильовими векторами в центрі та на краю зони Бріллюена. Залежність задається кусковою функцією. Зрозуміло, що в реальних умовах функція буде гладкою, бо в теорії не враховано ряду факторів: дисперсія КТ за розмірами, релаксаційні процеси, що пов'язані з розсіянням електронів на фононах та домішках надґраткової гетеросистеми.

- [1] R. Notzel, *Semicond. Sci. Technol.* **11**, 1359 (1996).
- [2] C. M. Sotomayor Torres *et al.*, *Proc. SPIE* **2141**, 2 (1994).
- [3] in *Optical Spectroscopy of Low Dimensional Semiconductors*, edited by G. Abstreiter *et al.*, NATO ASI Series E **344** (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1997), p. 400.
- [4] А. И. Екимов, А. А. Онущенко, *Письма Журн. эксп. теор. физ.* **40**, 338 (1984).
- [5] K. Brunner, *Rep. Prog. Phys.* **1**, 27 (2002).
- [6] J. Drucker, *IEEE J. Quantum Electron.* **38**, 975 (2002).
- [7] J. Stangl, V. Holy, G. Bauer, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 725 (2004).
- [8] L. Goldstein *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **47**, 1099 (1985).
- [9] D. E. Eaglesham, M. Cerullo, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1943 (1990).
- [10] J.-W. Mo *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1020 (1990).
- [11] T. Mano *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 1705 (2002).
- [12] N. N. Ledentsov *et al.*, *Phys. Rev. B* **54**, 8743 (1996).
- [13] N.N. Ledentsov, in *Proceedings of the 23rd International Conference on the Physics of Semiconductors*, edited by M. Scheffler, R. Zimmermann (World Scientific, Singapore, 1996), vol. 1, p. 19.
- [14] Z. M. Wang *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 1931 (2004).
- [15] T. Mano *et al.*, *J. Appl. Phys.* **95**, 109 (2004).
- [16] R. Martin, *Nanomaterials* **266**, 1961 (1994).
- [17] R. R. Li *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 1689 (2000).
- [18] V. A. Holovatsky, V. I. Gutsul, O. M. Makhanets, *Rom. J. Phys.* **52**, 327 (2007).
- [19] A. D. Andreev, E. P. O'Reilly, *Nanotechnology* **11**, 256 (2000).
- [20] A. D. Andreev, E. P. O'Reilly, *Appl. Phys. Lett.* **87**, 213106 (2005).
- [21] D. P. Williams, A. D. Andreev, E. P. O'Reilly, *Phys. Rev. B* **73**, 241301 (2006).
- [22] A. D. Andreev, E. P. O'Reilly, *Thin Solid Films* **364**, 291 (2000).
- [23] A. D. Andreev, E. P. O'Reilly, in *Excitonic Processes in Condensed Matter* (Electrochem. Proc. Ser. **98-25**), edited by R. T. Williams, W. M. Yen (Pennington, NJ, 1998), p. 272.
- [24] M. V. Tkach, I. V. Pronyshyn, A. M. Makhanets, V. M. Golovach, G. G. Zegrya, *Condens. Matter Phys.* **2**, 553 (1999).
- [25] Н. В. Ткач, А. М. Маханец, Г. Г. Зегря, *Физ. тех. полупр.* **36**, 543 (2002).
- [26] N. V. Tkach, A. M. Makhanets, G. G. Zegrya, *Semicond. Sci. Technol.* **15**, 395 (2000).
- [27] М. В. Ткач, О. М. Маханец, Г. Г. Зегря, *Наук. вісн. Чернівець. ун-ту* **132**, 59 (2002).
- [28] М. В. Ткач, О. М. Маханец, Г. Г. Зегря, *Укр. фіз. журн.* **48**, 155 (2003).
- [29] V. I. Boichuk, I. V. Bilynskiy, O. A. Sokolnyk, I. O. Shakleina, *Condens. Matter Phys.* **16**, 33702: 1 (2013).
- [30] В. І. Бойчук, І. В. Білинський, Р. І. Пазюк, І. О. Шаклеїна, *Фіз. хім. тверд. тіла* **10**, 752 (2009).
- [31] V. I. Boichuk, I. V. Bilynskiy, R. I. Pazyuk, in *Proceedings of the VIII International School-Conference* (Drohobych, 2013), p. 7.
- [32] В. І. Бойчук, І. В. Білинський, Р. І. Пазюк, *Актуал. пробл. фізики, математики та інформатики* №5, 78 (2013).
- [33] Н. А. Ефремов, С. И. Покутний, *Физ. тверд. тела* **27**, 48 (1985).
- [34] D. Schooss *et al.*, *Phys. Rev. B* **49**, 17072 (1994).
- [35] G. Q. Hai, F. M. Peeters, J. T. Devreese, *Phys. Rev. B* **48**, 4666 (1993).
- [36] А. С. Давыдов *Теория твердого тела* (Наука, Москва, 1972).
- [37] Г. М. Фихтенгольц *Курс дифференциального и интегрального исчисления* (Физматлит, Москва, 2001).

LIGHT ABSORPTION COEFFICIENT CAUSED BY SUB-BAND TRANSITIONS OF ELECTRONS IN SPHERICAL QUANTUM DOT SUPERLATTICES

V. I. Boichuk, I. V. Bilynsky, R. I. Pazyuk

*Franko Drohobych Pedagogical University, Department of Theoretical Physics,
Franko St., 24, Drohobych, 82100, Ukraine*

We analyze the electron energy spectrum in three-dimensional arrays of semiconductor quantum dots (QD) as a model of 3D-superlattice and its optical properties. Some numerical simulations have been suggested for the real spherical $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ quantum dot superlattice, where the concentration of Al changes within $x = 0.2, \dots, 1.0$. In the tight-binding approximation, the dispersion law of electrons is obtained and analyzed. The dependence of the electron energy on the wave vector for 1s- and three ($m = 0, \pm 1$) 1p-sub-bands for QDs of different radii and Al concentrations in the matrix of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ are calculated in details. The dependences of density of electron states on energy in the 1s- and 1p-sub-bands are obtained. It is shown that the density of states as a function of energy depends strongly on the QD size, distances between QDs and concentration x . Subsequently, we can control the electronic band structure of this spherical quantum dot superlattice when some parameters of the system are changed. The absorption coefficient of direct sub-band transitions is written in terms of a squared matrix element of the electronic transition and combined density of states. The conducted calculations have shown that in the dipole approximation electronic transitions are allowed between the sub-bands with $m = 0$. The absorption coefficient is characterized by two peaks that correspond to the electron wave vector in the center and at the edge of the Brillouin zone.