

Вплив ультразвуку на енергетичний спектр електрона та дірки у гетеросистемі InAs/GaAs з квантовими точками InAs

Р.М. Пелешак, О.В. Кузик, О.О. Даньків*

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

(Одержано 08.07.2016, опубліковано online 23.12.2016)

На основі методу електрон-деформаційного зв'язку та теорії збурень розроблено модель гетероструктури зі сферичними квантовими точками, що піддається впливу ультразвуку. В межах даної моделі досліджено вплив акустичної хвилі на енергію основного стану електрона і дірки, ширину забороненої зони та енергію рекомбінаційного випромінювання гетероструктури InAs/GaAs зі сферичними квантовими точками InAs. Запропонована модель враховує спотворення форми квантової точки та зміну її об'єму під впливом акустичної хвилі.

Ключові слова: Квантова точка, Ультразвук, Деформація, Енергія електрона і дірки.

DOI: 10.21272/jnep.8(4(2)).04064

PACS numbers: 61.46. – w, 73.21.La

1. ВСТУП

Напівпровідникові наногетероструктури InAs/GaAs з квантовими точками (КТ) InAs мають високий квантовий вихід фотолюмінесценції і є перспективним матеріалом для створення гетеролазерів у близькій інфрачервоній області спектру [1-9]. Джерела інфрачервоного випромінювання, які швидко змінюють свою частоту та напрям випромінювання, є важливим елементом оптичних систем зв'язку. Наногетероструктури InAs/GaAs з КТ InAs є чутливими до механічних напружень, що проявляється вже на стадії зародження КТ у процесі самоорганізації [10-14]. Тому є очікуваним, що за допомогою періодичної деформації (акустичної хвилі) можна швидко і прогнозовано перебудувати спектральні характеристики та напрям випромінювання гетеролазера [15-19] і, відповідно, збільшити кількість каналів передачі інформації волоконно-оптичними лініями зв'язку.

При ультразвуковій обробці гетероструктури з КТ можуть спостерігатися наступні ефекти:

- періодична деформація за рахунок самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку призводить до локального періодичного зміщення дна (вершини) зони провідності (валентної зони) і, відповідно, до модуляції енергії електрона та дірки [17];
- ультразвукова хвиля призводить до зміни невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів КТ і матриці і, відповідно, як до зміни енергії електрона та дірки [8], так і до зміни умов формування нанокластерів [14, 20];
- виникнення градієнта показника заломлення під дією ультразвуку призводить до періодичної зміни напрямку випромінювання лазерної гетероструктури [16];
- поширення ультразвуку у певному напрямку призводить до збільшення розмірів КТ у цьому напрямку, і, відповідно, до спотворення їх форми та зміни енергії електрона та дірки;
- зміна об'єму КТ під впливом ультразвуку призводить до зміщення дна (вершини) зони провідності

(валентної зони), що є причиною зміни ширини забороненої зони, і, відповідно, зміни спектральних характеристик гетероструктур з КТ.

У даній роботі досліджено останні два ефекти впливу ультразвуку на енергію електрона і дірки та ширину забороненої зони у наногетероструктурі InAs/GaAs з КТ InAs, обумовлені зміною форми та об'єму КТ.

2. МОДЕЛЬ

Розглянемо ізольовану напівпровідникову КТ сферичної форми, що піддається впливу ультразвуку. Поширення ультразвуку призводить до збільшення енергії атомів і, відповідно, до збільшення середньої відстані між ними в напрямку поширення акустичної хвилі. У роботах [21, 22] запропонована модель прискореного масопереносу в твердих тілах під дією періодичної деформації, в межах якої вважається, що вплив ультразвукової хвилі призводить до зростання "ефективної температури" T_{ef}

$$T_{ef} = T + T_{\sigma}, \quad (1)$$

де T – температура; $T_{\sigma} = \sigma_p (\varepsilon^d / \varepsilon^s)^{1/3} / (E \alpha_T)$; σ_p – границя пружності матеріалу КТ; ε^d , ε^s – швидкість деформації при динамічному та квазістатичному навантаженні, відповідно; E – модуль Юнга; α_T – коефіцієнт лінійного термічного розширення.

Вважатимемо, що ультразвукова хвиля поширюється вздовж осі Oz . Тоді середнє відхилення атомів від положення рівноваги, яке обумовлене нелінійністю їх взаємодії [23]:

$$\bar{z} = \alpha_T a_0 T_{ef} = \alpha_T a_0 T + \frac{a_0 \sigma_p (\varepsilon^d / \varepsilon^s)^{1/3}}{E}, \quad (2)$$

де a_0 – параметр кристалічної ґратки матеріалу КТ. Другий доданок визначає збільшення відстані між атомами за рахунок ультразвуку в напрямку поши-

* dankivolesya@ukr.net

рення акустичної хвилі. Це призводить до спотворення форми КТ (від сферичної до еліпсоїдної). Зокрема, вздовж напрямку поширення акустичної хвилі радіус КТ збільшиться і становитиме

$$R_z = b = R_0 \left(1 + \frac{\sigma_p (\varepsilon^d / \varepsilon^s)^{1/3}}{E} \right) = R_0 (1 + \varepsilon), \quad (3)$$

де $\varepsilon = \frac{\sigma_p (\varepsilon^d / \varepsilon^s)^{1/3}}{E}$; R_0 – радіус сферичної КТ (до дії ультразвуку). В перпендикулярних напрямках до поширення ультразвуку КТ зазнаватиме деформації стиску, а її розміри становитимуть [24]

$$R_x = R_y = a = R_0 (1 - \nu \varepsilon), \quad (4)$$

де ν – коефіцієнт Пуассона.

2.1 Вплив спотворення форми КТ на енергію основного стану електрона та дірки

Визначимо енергії основного стану електрона та дірки в КТ, що піддається дії ультразвуку.

Запишемо гамільтоніан ізольованої КТ:

$$\hat{H}^{(e,h)} = -\frac{\hbar^2}{2m^{(e,h)}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \hat{U}, \quad (5)$$

де $m^{(e,h)}$ – ефективна маса електрона (дірки) всередині ізольованого нанокристалу у вигляді еліпсоїда обертання; \hat{U} – потенціальна енергія носія заряду всередині ізольованого нанокристалу, який має форму еліпсоїда обертання:

$$\hat{U}(x, y, z) = \begin{cases} 0, & \frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} \leq 1 \\ \infty, & \frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} > 1. \end{cases} \quad (6)$$

Для того, щоб дослідити вплив спотворення сферичної форми КТ під дією ультразвуку на зсув енергетичного рівня основного стану квазічастинки (електрона або дірки), зробимо заміну змінних:

$$x = x', \quad y = y', \quad z' = \frac{a}{b} z. \quad (7)$$

З урахуванням заміни (7), гамільтоніан (5) набуде вигляду:

$$\hat{H}^{(e,h)} = -\frac{\hbar^2}{2m^{(e,h)}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2} + \frac{a^2}{b^2} \frac{\partial^2}{\partial z'^2} \right) + \hat{U}. \quad (8)$$

Представимо (8) у вигляді:

$$\hat{H}^{(e,h)} = \hat{H}_0^{(e,h)} + \hat{V}^{(e,h)},$$

$$\hat{H}_0^{(e,h)} = -\frac{\hbar^2}{2m^{(e,h)}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2} + \frac{\partial^2}{\partial z'^2} \right) + \hat{U},$$

$$\hat{V}^{(e,h)} = -\frac{\hbar^2}{2m^{(e,h)}} \left(\left(\frac{a^2}{b^2} - 1 \right) \frac{\partial^2}{\partial z'^2} \right), \quad (9)$$

де $\hat{H}_0^{(e,h)}$ – оператор Гамільтона незбуреної задачі; $\hat{V}^{(e,h)}$ – оператор збурення, зумовлений спотворенням сферичної форми КТ. Спотворена сферична форма КТ має вигляд еліпсоїда обертання. Підставивши (3), (4) у (9) та врахувавши, що $\sigma/E \ll 1$, отримуємо:

$$\hat{V}^{(e,h)} = \frac{\hbar^2 \varepsilon (1 + \nu)}{m^{(e,h)}} \frac{\partial^2}{\partial z'^2}, \quad (10)$$

Власні значення $E_{n0}^{(e,h)}$ та власні функції $\psi_{n0}^{(e,h)}$ незбуреного оператора Гамільтона знаходяться з розв'язку рівняння Шредінгера:

$$\hat{H}_0^{(e,h)} \psi_{n0}^{(e,h)}(r') = E_{n0}^{(e,h)} \psi_{n0}^{(e,h)}(r'). \quad (11)$$

Відомо, що енергія основного стану $E_{10}^{(e,h)}$ та власні функції $\psi_{100}^{(e,h)}$ оператора Гамільтона ізольованої КТ сферичної форми відповідно дорівнюють

$$E_{10}^{(e,h)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^{(e,h)} R_0^2}, \quad (12)$$

$$\psi_{100}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi R_0 r'}} \sin\left(\frac{\pi r'}{R_0}\right). \quad (13)$$

Тоді поправка першого порядку $E_{11}^{(e,h)}$ до енергії основного стану електрона чи дірки дорівнює

$$E_{11}^{(e,h)} = \int \psi_{100}^{(0)*} \hat{V} \psi_{100}^{(0)} dV' = \frac{\hbar^2 \varepsilon (1 + \nu)}{m^{(e,h)}} \int \psi_{100}^{(0)*} \frac{\partial^2}{\partial z'^2} \psi_{100}^{(0)} dV'. \quad (14)$$

Обчисливши інтеграл, який входить у вираз (14), з урахуванням (13), отримуємо поправку першого порядку $E_{11}^{(e,h)}$ до енергії основного стану електрона чи дірки:

$$E_{11}^{(e,h)} = -\frac{\pi^2 \hbar^2 \varepsilon (1 + \nu)}{3m^{(e,h)} R_0^2}. \quad (15)$$

Тоді повна енергія електрона чи дірки в основному стані може бути обчислена за формулою:

$$E_1^{(e,h)} \approx E_{10}^{(e,h)} + E_{11}^{(e,h)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^{(e,h)} R_0^2} \left(1 - \frac{2\varepsilon(1 + \nu)}{3} \right). \quad (16)$$

Як бачимо з формули (16), спотворення форми КТ під впливом ультразвуку призводить до зменшення енергії основного стану електрона та дірки.

2.2 Вплив зміни об'єму КТ на ширину її забороненої зони

Як бачимо з формул (3), (4), дія акустичної хвилі не тільки спотворює форму КТ, але й змінює її об'єм. Відносна зміна об'єму КТ ε_0 у лінійному наближенні становить

$$\varepsilon_0 = 2 \frac{a - R_0}{R_0} + \frac{b - R_0}{R_0} = \varepsilon(1 - 2\nu). \quad (17)$$

Пружна деформація матеріалу КТ призводить до енергетичного зміщення країв дозволених зон [8]:

$$\Delta E_c = \alpha_c \varepsilon_0 = \alpha_c \varepsilon(1 - 2\nu), \quad (18)$$

$$\Delta E_v = \alpha_v \varepsilon_0 = \alpha_v \varepsilon(1 - 2\nu), \quad (19)$$

де ΔE_c , ΔE_v – енергетичне зміщення дна зони провідності та вершини валентної зони, відповідно; α_c , α_v – константи гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності та валентної зони, відповідно.

Тоді зміна ширини забороненої зони:

$$\Delta E_g = \Delta E_c - \Delta E_v = \varepsilon(1 - 2\nu)(\alpha_c - \alpha_v). \quad (20)$$

Для напівпровідника InAs коефіцієнт Пуассона і константи гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності та валентної зони приймають наступні значення [25]: $\nu = 0.352$; $\alpha_c = -5.08$ eV; $\alpha_v = 1$ eV. Як бачимо з формули (20), вплив ультразвуку призводить до зменшення ширини забороненої зони КТ InAs ($\alpha_c < 0$).

Зміна енергії рекомбінаційного випромінювання, що відповідає переходу між основними станами електрона та дірки в гетероструктурі InAs/GaAs з КТ InAs з врахуванням формул (15) та (20) може бути визначена наступним чином:

$$\Delta E = E_{11}^{(e)} + E_{11}^{(h)} + \Delta E_g = - \left(\frac{\pi^2 \hbar^2 (1 + \nu) (m^{(e)} + m^{(h)})}{3 R_0^2 m^{(e)} m^{(h)}} + (1 - 2\nu)(|\alpha_c| + \alpha_v) \right) \varepsilon \quad (21)$$

де перший доданок визначає зменшення енергії рекомбінаційного випромінювання, обумовлене спотворенням сферичної форми КТ, а другий доданок – збільшенням об'єму КТ під впливом ультразвуку. Формулу (21) також можна переписати у вигляді:

$$\Delta E = - \left(\frac{2}{3} (1 + \nu) (E_{10}^{(e)} + E_{10}^{(h)}) + (1 - 2\nu)(|\alpha_c| + \alpha_v) \right) \varepsilon. \quad (22)$$

3. ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ ТА ВИСНОВКИ

У роботі розроблено модель ізольованої КТ, яка піддається впливу ультразвуку. В межах даної моделі досліджено закономірності зміни енергії основного стану електрона і дірки, а також енергії рекомбінаційного випромінювання КТ InAs під впливом ультразвуку. Запропонована модель ґрунтується на використанні ідеї про зростання “ефективної температури” у твердих тілах, які піддаються впливу ультразвуку [21, 22], що є причиною виникнення термічної деформації КТ (зміни як її форми, так і об'єму). Перший фактор (спотворення форми) призводить до зменшення енергії основного стану електрона та дірки, а другим (зміна об'єму) – до зменшення ширини забороненої зони. В межах даної моделі не враховується вплив ультразвуку на величину розриву зон провідності між матеріалами матриці та КТ і взаємодія між КТ (розглядається ізольована КТ). Ці фактори враховані у роботі [8] і не є суттєвими, особливо при малих деформаціях.

Як бачимо з формули (22), зменшення енергії випромінювання КТ InAs є пропорційним параметру ε , що визначається пружними сталими матеріалу КТ та швидкістю зміни деформації, яка залежить як від амплітуди деформації, так і частоти акустичної хвилі. Результати розрахунків показують, що при $\varepsilon = 2.3 \cdot 10^{-4}$ ($R_0 = 3$ nm; $m^{(e)} = 0.057m_0$; $m^{(h)} = 0.41m_0$) зменшення енергії рекомбінаційного випромінювання становить 0,6 meV. Розрахунки проведені в даній роботі добре узгоджуються з результатами експериментальних досліджень впливу поверхневої акустичної хвилі частотою 3 ГГц на випромінювання КТ InAs, які отримані у роботі [15]. У цій роботі показано, по-перше, що акустична хвиля призводить до модуляції енергії випромінювання (розширення спектральної лінії) [17], по-друге, що збільшення інтенсивності акустичної хвилі призводить до лінійного зменшення енергії випромінювання. Зокрема, при збільшенні потужності акустичної хвилі від 5 dBm до 15 dBm енергія випромінювання зменшується на 0,2 meV та 0,6 meV, відповідно.

Правильний вибір частоти ультразвуку (довжини хвилі) повинен сприяти збільшенню амплітуди звукової хвилі. Можна припустити, що максимальне збільшення амплітуди акустичної хвилі буде спостерігатися при певному співвідношенні між довжиною хвилі та відстанню між КТ і їх розмірами [26].

Маючи експериментальні дані зсуву енергії випромінювання КТ під впливом ультразвуку, можна розв'язувати обернену задачу знаходження деформації, яку створює акустична хвиля.

Effect of Ultrasound on the Energy Spectrum of Electrons and Holes Heterosystem in InAs / GaAs Quantum Dots of InAs

R.M. Peleshchak, O.V. Kuzyk, O.O. Dan'kiv

Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University, 24, Ivan Franko st., 82100 Drohobych, Ukraine

On the basis of the method of electron-deformation relation and perturbation theory the model of heterostructure with spherical quantum dots which is exposed to ultrasound is developed. Within this model it is investigated the influence of the acoustic wave on the ground state energy of electron and hole, the band gap energy and energy of recombination radiation of InAs/GaAs heterostructure with InAs spherical quantum dots. The offered model considers the distortion of the form of quantum dot and its volume change under the influence of the acoustic wave.

Keywords: Quantum dot, Ultrasound, Deformation, Energy of electron and hole.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. N.N. Ledentsov, *Semicond. Sci. Technol.* **26**, 014001 (2011).
2. A.O. Kosogov, P. Werner, U. Gösele, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 11 (1996).
3. A.M. Nadtochiy, S.A. Blokhin, A. Mutig, J.A. Lott, N.N. Ledentsov, L.Ya. Karachinskiy, M.V. Maximov, V.M. Ustinov, D. Bimber, *Semiconductors* **45**, 679 (2011).
4. M.V. Maximov, Yu.M. Shernyakov, F.I. Zubov, A.E. Zhukov, *Semicond. Sci. Technol.* **28**, 105016 (2013).
5. E. Stock, M.-R. Dachner, T. Warming, A. Schliwa, *Phys. Rev.* **83**, 041304 (2011).
6. M.V. Tkach, Ju.O. Seti, O.M. Voitsekhivska, *Condens. Matter Phys.* **11**, 463 (2008).
7. E. Sadeghi, *Physica E* **73**, 1 (2015).
8. B.V. Novikov, G.G. Zegrya, R.M. Peleshchak, O.O. Dan'kiv, V.A. Gaisin, V.G. Talalaev, I.V. Shtorm, G.E. Cirlin, *Semiconductors* **42**, 1076 (2008).
9. R.M. Peleshchak, S.K. Guba, O.V. Kuzyk, I.V. Kurilo, O.O. Dan'kiv, *Semiconductors* **47**, 349 (2013).
10. W. Yang, B. Zhang, N. Ding, W. Ding, L. Wang, M. Yu, Q. Zhang, *Ultrasonics Sonochemistry* **30**, 103 (2016).
11. N.N. Ledentsov, V.M. Ustinov, V.A. Shchukin, P.S. Kop'ev, Zh.I. Alferov, D. Bimberg, *Semiconductors* **32**, 343 (1998).
12. R.M. Peleshchak, I.I. Lazurchak, O.V. Kuzyk, O.O. Dan'kiv, G.G. Zegrya, *Semiconductors* **50**, 314 (2016).
13. R.M. Peleshchak, O.V. Kuzyk, O.O. Dan'kiv, *Condens. Matter Phys.* **18**, 43801 (2015).
14. R.M. Peleshchak, O.V. Kuzyk, O.O. Dan'kiv, *J. Nano-Electron. Phys.* **8**, 02014 (2016).
15. J.R. Gell, M.B. Ward, R.J. Young, R.M. Stevenson, P. Atkinson, D. Anderson, G.A.C. Jones, D.A. Ritchie, A.J. Shields, *Appl. Phys. Lett.* **93**, 081115 (2008).
16. R.M. Peleshchak, O.O. Dan'kiv, O.V. Kuzyk, *Ukr. J. Phys.* **57**, 68 (2012).
17. R.M. Peleshchak, O.O. Dan'kiv, O.V. Kuzyk, *Ukr. J. Phys.* **56**, 344 (2011).
18. L.A. Kulakova, *Fiz. Tverd. Tela* **51**, 73 (2009).
19. L.A. Kulakova, A.V. Lyutetskii, and V.B. Voloshinov, *Pis'ma Zh. Tekh. Fiz.* **36**, 48 (2010).
20. R.M. Peleshchak, O.V. Kuzyk, O.O. Dan'kiv, *Condens. Matter Phys.* **17**, 23601 (2014).
21. Ю.Я. Мешков, Д.С. Герцрикен, В.Ф. Мазанко, *Металлофизика и новейшие технологии* **18**, 52 (1996) (Yu.Ya. Meshkov, D.S. Gertsriken, V.F. Mazanko, *Metallofiz. Noveyshie Tekhnol.* **18**, 52 (1996)).
22. A.I. Vlasenko, A. Baidullaeva, V.P. Veleschuk, P.E. Mozol, N.I. Boiko, O.S. Litvin, *Semiconductors* **49**, 229 (2015).
23. А.И. Ансельм, *Введение в теорию полупроводников* (Москва: Мир: 1978) (A.I. Ansel'm, *Vvedeniye v teoriyu poluprovodnikov* (Moskva: Mir: 1978)).
24. L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Theory of elasticity* (London: Pergamon Press: 1970).
25. Chris G. Van de Walle, *Phys. Rev. B* **39**, 1871 (1989).
26. P.M. Tomchuk, N.I. Grigorchuk, D.V. Butenko, *Ukr. J. Phys.* **55**, 440 (2010).