УДК 621.373.826

А.Г. ПАЩЕНКО, В.М. ВАНЦАН, канд. физ.-мат. наук

ИССЛЕДОВАНИЕ СТАЦИОНАРНЫХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СОСТОЯНИЙ ЭКСИТОНОВ ВАНЬЕ — МОТТА В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ИНЖЕКЦИОННЫХ ЛАЗЕРАХ НА ОСНОВЕ КВАНТОВОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР

Влияние экситонов на физические процессы, протекающие в полупроводниковых лазерах, достаточно подробно рассмотрено в работе [1]. Установлено, что экситонные переходы могут служить каналом для накачки; экситонное поглощение и поглощение света экситонами могут давать существенный вклад в потери; связывание носителей в экситоны может затруднить генерацию на переходах с участием свободных носителей; возможна лазерная генерация на экситонных переходах. Однако реализации идей, высказанных в [1], препятствовал ряд причин. К ним следует отнести несовершенство технологии изготовления полупроводниковых лазерных кристаллов, отсутствие глубоких теоретических и экспериментальных исследований экситонов в полупроводниках.

Благодаря развитию новейших технологических методов получения гетероструктур, квантоворазмерных структур и гетероструктур с квантоворазмерными слоями появилась возможность реализовать отрицательное поглощение, использовав новые физические механизмы, в том числе экситонной люминесценции.

Переход от лазеров на основе гомоструктур к лазерам на основе гетеро- и квантоворазмерных структур невозможен без изучения физических явлений в полупроводниковых лазерных кристаллах на новом уровне с привлечением аппарата квантовой механики, так как в данном случае частицы проявляют не только корпускулярные, но и волновые свойства.

Цель работы — описание расчета энергетических состояний электронов, легких и тяжелых дырок, экситонов Ванье — Мотта на легких и тяжелых дырках в прямоугольной квантовой яме, ограниченной потенциальными барьерами, для случаев бесконечно высокого и бесконечно широкого потенциального барьера, барьера конечной высоты и бесконечной ширины.

Для частицы, находящейся в бесконечно глубокой одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной L_z, энергетические состояния определяются из решения уравнения Шредингера с эффективным гамильтонианом:

$$-\frac{h^2}{2m^*}\frac{d^2\Psi}{dz^2}=E\Psi, \qquad (1)$$

где h — постоянная Планка; m^* — эффективная масса частиць (электрона, легкой или тяжелой дырки): Ψ — волновая функция, E — энергия состояния частицы в яме. При этом дно ямы для электроноі совпадает с дном зоны проводимости, а дно ямы для легких и тяжелы дырок совпадает с потолком валентной зоны.

Решение уравнения (1) имеет вид

$$\Psi^+ = A\cos\left[\left(2m^*E/h^2\right)^{1/2}z\right] \qquad (2)$$

для четной части волновой функции;

$$\Psi^- = B\sin\left[\left(2m^*E/h^2\right)^{1/2}z\right] \qquad (3)$$

для нечетной части этой функции.

Коэффициенты A, B в (2), (3) определяются из условия нормировки, $A = B = L_z/2$.

Собственные значения энергии, удовлетворяющие уравнению (1), для любой частицы, находящейся в яме, составляют

$$E=\frac{h^2\pi^2n^2}{2m^*L_z^2}, \qquad n=1,\ 2,\ 3,\ldots \qquad (4)$$

Для частицы, находящейся в одномерной потенциальной яме, ограниченной барьером конечной высоты V и бесконечной ширины в направлении оси z, уравнение Шредингера записывается так:

$$-\frac{h^2}{2m_1^*}\frac{d^2\Psi_1}{dz^2}=E\Psi_1 \qquad (5)$$

в области ямы, а

$$-\frac{h^2}{2m_2^*}\frac{d^2\Psi_2}{dz^2}+V\Psi_2=E\Psi_2 \tag{6}$$

в области барьера.

При этом должны выполняться следующие условия:

$$\Psi_1=0 \quad \text{при} \quad z=\pm\infty\,; \tag{7}$$

$$\Psi_1(L_z/2)=\Psi_2(L_z/2);\quad \frac{1}{m_1^*}\frac{d\Psi_1}{dz}\bigg|_{z=L_z/2}=\frac{1}{m_2^*}\frac{d\Psi_2}{dz}\bigg|_{z=L_z/2}, \tag{8}$$

где m_1^*, m_2^* — эффективные массы частиц в области ямы и барьера соответственно. Волновые функции, удовлетворяющие уравнениям (5), (6), могут быть представлены в виде

$$\Psi_1^+=A_1\cos k_1 z,\quad -\frac{L_z}{2}\le z\le\frac{L_z}{2}\,; \tag{9}$$

$$\Psi_2^-=B_1\sin k_1 z,\quad -\frac{L_z}{2}\le z\le\frac{L_z}{2} \tag{10}$$

для четной (+) и нечетной (-) частей волновой функции частицы в яме.

При этом

$$\Psi_2=A_2 e^{k_2 z},\qquad -\infty<z\le -L_z/2\,; \tag{11}$$

$$\Psi_2=B_2 e^{-k_2 z},\qquad -\infty<z\le -L_z/2 \tag{12}$$

для волновых функций частиц в области барьера.

Здесь

$$k_1^2 = 2m_1^* E / h^2 ; \tag{13}$$

$$k_2^2 = 2m_2^* (V - E) / h^2 . \tag{14}$$

Значения энергии E частиц в рассматриваемом случае определяется из решения трансцендентных уравнений

$$\mathrm{tg}\left(k_1 \frac{L_z}{2} \right) = \frac{k_2}{k_1} \frac{m_1^*}{m_2^*} ; \tag{15}$$

$$-\mathrm{ctg}\left(k_1 \frac{L_z}{2} \right) = \frac{k_2}{k_1} \frac{m_1^*}{m_2^*} . \tag{16}$$

Решения уравнений (15), (16) можно искать графически или используя численные методы. Уравнения удобно записать так:

$$E = \frac{2h^2}{m_1^* L_z^2} \left[n\pi - \arccos \sqrt{\frac{m_2^* E}{m_1^* (V - E) + m_2^* E}} \right]^2 \tag{17}$$

для четных частей волновых функций (n — нечетное) и

$$E = \frac{2h^2}{m_1^* L_z^2} \left[n\pi - \arcsin \sqrt{\frac{m_2^* E}{m_1^* (V - E) + m_2^* E}} \right]^2 \tag{18}$$

для нечетных частей волновых функций, (n — четное).

Для случая прямоугольной квантовой ямы, ограниченной симметричными, равновысокими потенциальными барьерами конечной высоты и ширины, решение уравнений Шредингера (5), (6) с граничными условиями (7), (8) имеют вид

$$\Psi_1^+ = B_1 \cos k_1 z, \quad -\frac{L_z}{2} \le z \le \frac{L_z}{2}; \tag{19}$$

$$\Psi_1^- = A_1 \sin k_1 z, \quad -\frac{L_z}{2} \le z \le \frac{L_z}{2}; \tag{20}$$

$$\Psi_2 = A_2 e^{k_2(z-l)} + B_2 e^{-k_2(z-l)};$$

$$-L_b \le z \le -L_z/2, \; L_z/2 \le z \le L_b, \tag{21}$$

где $l = (L_z + L_b)/2$; L_b — ширина барьера,

После несложных преобразований выражение (21) принимает вид

$$\Psi_2^+ = C_2 \operatorname{ch}\left[k_2(z-l)\right] \tag{22}$$

для четной части волновой функции, в области барьера, и

$$\Psi_2^- = D_2 \operatorname{sh}\left[k_2(z-l)\right] \tag{23}$$

для нечетной части волновой функции.

Собственные значения энергии частиц в рассматриваемом случае являются корнями трансцендентного уравнения

$$\operatorname{tg}(k_1 L_z/2) = \left(m_1^* k_2 / m_2^* k_1\right) \operatorname{th}(k_1 L_b/2) \tag{24}$$

для четной части волновой функции в области ямы и

$$\operatorname{ctg}(k_1 L_z/2) = -\left(m_1^* k_2 / m_2^* k_1\right) \operatorname{cth}(k_1 L_b/2) \tag{25}$$

для нечетной части волновой функции.

Если для решения уравнений (24), (25) использовать не графические, а численные методы, что значительно удобнее для анализа, то (24) и (25) целесообразно записать в виде

$$E = \frac{2h^2}{m_1^* L_z^2}\left[n\pi - \arccos\frac{1}{\sqrt{\left[\frac{k_2 m_1^*}{m_2^* k_1}\text{th}\left(k_2 L_b/2\right)\right]^2 + 1}}\right]^2 \qquad (26)$$

или

$$E = \frac{2h^2}{m_1^* L_z^2}\left[n\pi - \arcsin\frac{1}{\sqrt{\left[\frac{k_2 m_1^*}{m_2^* k_1}\text{cth}\left(k_2 L_b/2\right)\right]^2 + 1}}\right]^2. \qquad (27)$$

Рассмотренная задача с барьером конечной высоты и ширины яв ляется частным случаем нахождения частиц в периодическом потенциальном поле. Если $V(z)$ — периодическая функция с периодом l, где $l = (L_z + L_b)$ или $l = (L_z + L_b)/2$, то уравнение Шредингера инвариантно ко всем трансляциям, кратным l [2], т.е. $V(z + l) = V(z)$. Следовательно, полученные решения (26), (27) могут быть распространены на случай квантоворазмерной структуры со многими квантовыми ямами.

В настоящее время наиболее широкое распространение получили квантоворазмерные структуры, выполненные на основе соединений **GaAs/Al$_x$Ga$_{1-x}$As.** Здесь материал ямы — **GaAs**, материал барьера — **Al$_x$Ga$_{1-x}$As,** а x показывает молярную долю **Al** в твердом растворе замещения материала барьера. Таким образом, изменение свойств материала барьера будет зависеть от содержания в нем **Al.**

Принято оценивать эффективные массы тяжелых и легких дырок с помощью соотношений Латтингера:

$$m_{hh} = \frac{m_0}{(\gamma_1 - 2\gamma_2)}; \qquad (28)$$

$$m_{lh} = \frac{m_0}{(\gamma_1 + 2\gamma_2)}, \quad (29)$$

где m_0 — масса свободного электрона; m_{hh}, m_{lh} — приведенные массы тяжелой и легкой дырок; γ_1, γ_2 — константы Латтингера для данного материала. Зависимость ширины запрещенной зоны E_g, приведенной массы электрона m_c/m_0 в зоне проводимости, постоянных Латтингера γ_1, γ_2 и диэлектрической проницаемости ε_0 от содержания **Al** в твердом растворе **$Al_xGa_{1-x}As$** отражена в таблице [3].

Параметры	GaAs	AlAs	$Al_xGa_{1-x}As$
E_g, эВ	1,424	3,018	1,424 + 1,247x, 0 < x < 0,45 1,424 + 1,247x + 1,147 (x - 0,45), 0,45 < x <1
m_c/m_0	0,067	0,124	0,067 + 0,057x
γ_1	6,85	3,45	6,85 - 3,4x
γ_2	2,1	0,68	2,1 - 1,42x
ε_0	13,0	9,0	13,0 - 4,0x

Нами выполнен расчет стационарных энергетических состояний экситонов Ванье — Мотта в квантоворазмерной структуре на основе **$GaAs/Al_xGa_{1-x}As$** с одной квантовой ямой, ширина которой изменялась в пределах 0,5 ... 20 нм, а ширина барьера — 1 ... 30 нм. Сравнение результатов расчета с экспериментальными данными [4] показало, что при ширине ямы $L_z \le 2a_B$, где a_B — боровский радиус водородоподобного примесного состояния в объемном полупроводнике, различие составляет 0,3 %.

Проведенные расчеты использованы для определения частоты возможного излучательного перехода по известному правилу частот Бора при соблюдении правил отбора по волновому вектору и энергии. Затем на основании модели гармонического осциллятора определено спонтанное время жизни частиц и квазичастиц на рассчитанных энергетических уровнях по формуле

$$\tau_{сп} = \frac{6\pi\varepsilon_0 c^3 m^*}{e^2 \omega_0^2}, \quad (30)$$

где ε_0 — диэлектрическая постоянная; c — скорость света; m^* — эффективная масса частицы (или квазичастицы); e — заряд электрона, ω_0 — частота перехода.

Оценив спонтанное время жизни частицы (или квазичастицы) $\tau_{сп}$ на энергетическом уровне, можно сделать вывод о его стабильности и, следовательно, о возможности создания на этом уровне инверсной населенности.

Выполненные расчеты можно принять как базовые для последующего определения статических и динамических характеристик полупроводниковых инжекционных лазеров на основе квантоворазмерных структур — **$GaAs/Al_xGa_{1-x}As$.**

Список литературы: 1. *Машкевич В.С.* Кинетическая теория лазеров. М.: Наука, 1971. 472 с. 2. *Флюге З.* Задачи по квантовой механике: В 2 т.: Пер. с англ. М.: Мир. Т. 1. 1974. 341 с. 3. *Debernardi P., Pisoni A., Bova G.P.* Quantum-well nonlinear optical response, including valence-band mixing and Coulomb effect // IEEE J. Quant. Electron. 1994. V. 30, N 1. P. 93 - 107. 4. *Kodama T., Osaka Y., Yamanishi M.* Binding energies of wannier excitons // Jap. J. Appl. Physics. 1985. V. 24, N 10. P. 1370 - 1371.

Харьковский государственный технический университет радиоэлектроники

Поступила в редколлегию 23.04.97