

ВЫЧИСЛЕНИЕ СПЕКТРОВ УСИЛЕНИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СТРУКТУРЫ С ОДИНОЧНОЙ КВАНТОВОЙ ЯМОЙ

КЛИМЕНКО М.В., ШУЛИКА А.В.,
САФОНОВ И.М., СУХОИВАНОВ И.А.

Предлагается метод вычисления спектров усиления полупроводниковой структуры с одиночной квантовой ямой. Вычисления оптических характеристик основаны на «Золотом правиле Ферми», для приложения которого дисперсионные законы носителей заряда должны быть известны. Зонная структура носителей заряда вычисляется с помощью кр-метода в приближении огибающей с использованием комбинации метода матриц переноса и метода Галеркина.

Введение

Эффекты размерного квантования в полупроводниковых наногетероструктурах значительно влияют на характеристики твердого тела. Данная работа посвящена анализу оптических свойств полупроводниковой одиночной квантовой ямы (КЯ) с учетом непараболичности валентной зоны.

Целью исследования является разработка эффективного метода вычисления спектров усиления такого рода наногетероструктур.

В работе выполнены задачи конструирования гамильтониана валентной зоны и его диагонализации, построения и реализации моделей и алгоритмов вычисления зонной структуры, плотности состояний, матричного элемента оптического перехода и спектров усиления одиночной КЯ GaAs/Al_xGa_{1-x}As.

1. Алгоритм и теория

Теория спектра усиления/поглощения в полупроводниковых наноструктурах включает в себя множество физических аспектов, основными из которых являются зонная структура и вероятность оптического перехода. Результаты, представленные в данной работе, основаны на «золотом правиле Ферми» для вероятности оптического межзонного перехода. Спектры усиления, двумерного электронного газа, в рамках этого правила, определяются выражением:

$$g(\hbar\omega) = \frac{8\pi l_r^2 \omega^2}{\hbar c^2} C_0 \frac{2}{V} \sum_{k_x} \sum_{k_y} |H_{eh}(k_x, k_y)|^2 \times$$

$$\times \delta(E_e(k_x, k_y) - E_h(k_x, k_y) - \hbar\omega) [F_c(E_e) - F_v(E_h)],$$

где $H_{eh}(k_x, k_y)$ – матричный элемент перехода; $E_e(k_x, k_y)$, $E_h(k_x, k_y)$ – законы дисперсии для зоны проводимости и валентной зоны соответственно; $F_c(E_e)$, $F_v(E_h)$ – функции распределения электронов и дырок; ω – циклическая частота

фотона; n_r – показатель преломления; V – объем элементарной ячейки; m_0 – масса покоя электрона; e – элементарный заряд; ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума; c – скорость света в вакууме, $C_0 = \pi e^2 / n_r \epsilon_0 m_0^2 \omega$.

Согласно выражению (1), для вычисления спектров усиления зонная структура материала должна быть известной. Входными данными при вычислении зонной структуры являются материальные параметры и геометрия структуры, как показано на рис. 1. Если зонная структура и волновые функции носителей заряда известны, то возможно вычислить матричный элемент перехода, который для ТМ поляризованного излучения имеет вид:

$$|H_{eh}|^2 = 1/3 \langle S | e z | Z \rangle^2 \times$$

$$\times \left[\langle f_e | f_h(s=1/2) \rangle^2 + \langle f_e | f_h(s=-1/2) \rangle^2 \right], \quad (2)$$

где $\langle S | e z | Z \rangle = -e\hbar(E_g + \Delta) / (\sqrt{2}E_g(E_g + 2\Delta/3)m_{eff})$, f_e , f_h – огибающие функции для электронов и дырок соответственно; s – спин; E_g – ширина запрещенной зоны; Δ – энергия спин-орбитального взаимодействия; m_{eff} – эффективная масса электрона.

После вычислений зонной структуры, матричного элемента перехода и функций распределения, на последнем этапе вычисляется собственно спектр усиления.

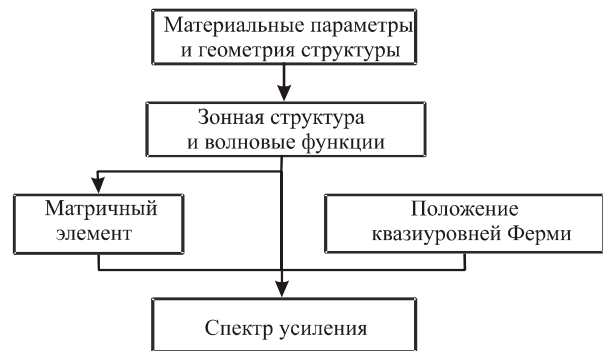


Рис. 1. Общий алгоритм

2. Вычисление зонной структуры

В алгоритме, представленном на рис. 1, наиболее сложным представляется блок вычисления зонной структуры. Он инкапсулирует в себе сложный алгоритм, общая схема которого представлена на рис. 2.

Зона проводимости с хорошим приближением может быть аппроксимирована параболическим законом дисперсии:

$$E_e = E_g + \frac{\hbar^2}{2m_{eff}} [k_x^2 + k_y^2 + k_z^2], \quad (3)$$

где k_x , k_y , k_z – компоненты волнового вектора. Зонная структура валентной зоны вычислялась в рамках к·р-метода и приближения огибающей.

Для описания валентной зоны использовался четырехзонный гамильтониан Латтинжера-Кона, который для массивного полупроводника имеет вид:

$$H_{LK} = \begin{bmatrix} E_{hh} & S & R & 0 \\ & E_{lh} & 0 & -S \\ & & E_{lh} & -R \\ & & & E_{hh} \end{bmatrix}, \quad (4)$$

где:

$$E_{hh} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[(\gamma_1 + \gamma_2)k_x^2 + (\gamma_1 + \gamma_2)k_y^2 + (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z^2 \right],$$

$$E_{lh} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[(\gamma_1 - \gamma_2)k_x^2 + (\gamma_1 - \gamma_2)k_y^2 + (\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z^2 \right],$$

$$S = \frac{\hbar^2}{2m_0} 2\sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y)k_z,$$

$$R = \frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} \left[-\gamma_2(k_x^2 - k_y^2) + 2i\gamma_3 k_x k_y \right],$$

$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ – параметры Латтинжера.

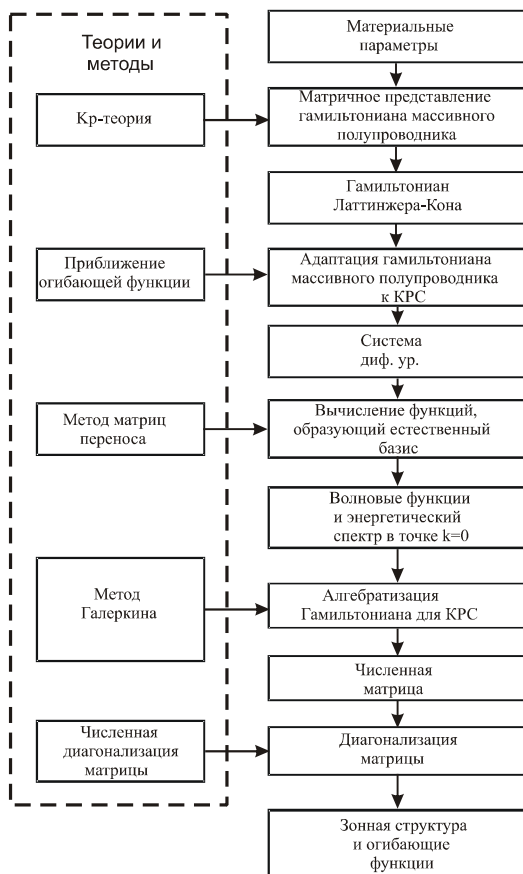


Рис. 2. Алгоритм вычисления зонной структуры

Все элементы матрицы (4) зависят от волнового вектора. Собственные значения матрицы (4), найденные для каждой точки пространства волновых векторов, представляют собой зонную структуру валентной зоны массивного полупроводника. Для учета квантово-размерных эффектов мы используем приближение огибающей функции, согласно

которому волновая функция кристалла, при наличии ограничивающего потенциала, дополнительного к кристаллическому, имеет вид:

$$\Psi_j^\sigma(\mathbf{r}) = \psi^\sigma(\mathbf{r}_{\parallel}) \cdot \exp(ik_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}) \cdot f_j^\sigma(z), \quad (5)$$

где: $\psi^\sigma(\mathbf{r}_{\parallel})$ – амплитудные множители Блоха; $f_j^\sigma(z)$ – огибающая функция.

В представлении (5) гамильтониан (4) преобразуется к новому виду – матрице, элементы которой являются дифференциальными операторами, так как все составляющие волнового вектора в направлении квантового ограничения преобразуются в операторы импульса. В результате, для нахождения энергетического спектра и огибающих функций необходимо решать систему четырех дифференциальных уравнений типа Шредингера для валентной зоны:

$$\left[H_{LK} \left(k_z \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial z} \right) + V(z) \right] f = E f \quad (6)$$

и уравнение Шредингера для зоны проводимости:

$$\left[E_g + \frac{\hbar^2}{2m_{\text{eff}}} \left(k_x^2 + k_y^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(z) \right] f = E f. \quad (7)$$

Для решения (6) использовался метод Галеркина [1]. Искомую огибающую функцию представим в виде ряда

$$f_j^\sigma(z) = \sum_p a_p^\sigma \xi_p^\sigma(z), \quad (8)$$

где: a_p^σ – коэффициенты разложения; $\xi_p^\sigma(z)$ – базисные функции разложения.

В качестве базисных функций разложения (8) использовались решения задачи Бена-Даниеля-Дюка, которая представляет собой задачу (1) для точки $k=0$. В этой точке система (6) распадается на четыре независимых уравнения Шредингера, которые решались методом матриц переноса [2]. Решения уравнений Шредингера образуют полную ортонормированную систему функций, удовлетворяющих граничным условиям, что позволяет рассматривать их как естественный базис [3].

В результате приложения метода Галеркина задача (6) преобразуется в систему линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов разложения:

$$\left\langle \xi_j^\sigma \left| H_{LK} \left(k_z \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial z} \right) + V - E \delta_{jp} \right| \sum_p a_p^\sigma \xi_p^\sigma(z) \right\rangle = 0. \quad (9)$$

Найти энергетический спектр можно из условия разрешимости системы (9) (детерминант матрицы, составленной из коэффициентов при неизвестных должен равняться нулю). Уравнение (7) решалось полуаналитическим методом, описанным в [4].

3. Результаты и обсуждение

Для апробации модели была выбрана широко распространенная структура GaAs/Al_xGa_{1-x}As с шириной квантовой ямы 10 нм. Параметры такой структуры хорошо известны [5]. На рис. 3,а изображены результаты вычисления энергетического спектра задачи (7) вдоль направления [100] в пространстве волновых векторов.

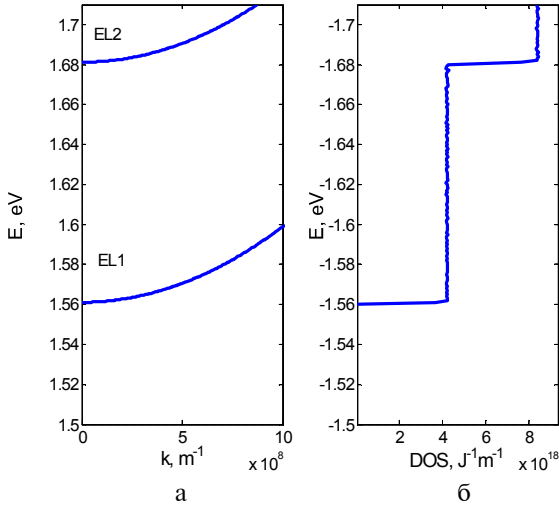


Рис. 3. Зона проводимости и плотность состояний

Плотность состояний зоны проводимости изображена на рис. 3,б. Вычисление плотности состояний осуществлялось численно. Результат, как видно, представляет собой ступенчатую функцию и полностью совпадает с аналитическим видом плотности состояний КРС с параболическим законом дисперсии. Законы дисперсии и плотность состояний для первых шести подзон валентной зоны показаны на рис.4.

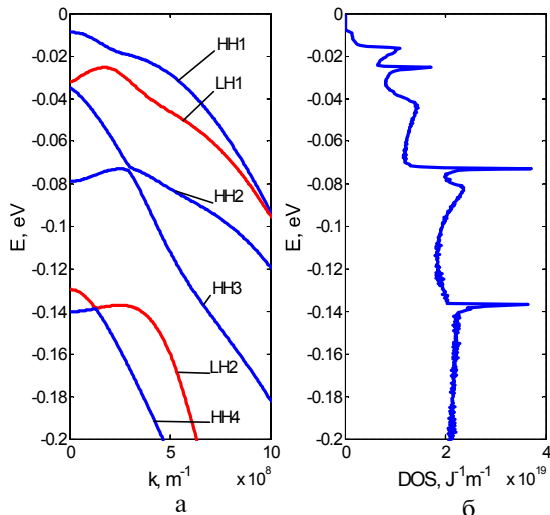


Рис. 4. Валентная зона и плотность состояний

Эти зависимости имеют более сложную форму и характеризуются точками антипересечений, которые обусловлены эффектом перемешивания подзон. Плотность состояний дырок четко отражает эти эффекты. В областях энергий, где имеет место экстремум закона дисперсии, на плотности состояний возникают особенности Ван Хофа, которые

затем отражаются на форме спектра усиления. Мы сравнивали наши результаты с результатами работы [6], где проводились более точные вычисления с использованием большой ЭВМ. Отклонения результатов зависят от номера подзоны и волнового вектора. Для первых трех подзон валентной зоны отклонения результатов для волнового вектора длиной 10^9 м^{-1} в направлении [100] составляют: для подзоны HH1 – 1 мэВ, для подзоны LH1 – 15 мэВ, для подзоны HH2 – 20 мэВ. Как видно, с ростом номера подзоны отклонение возрастает, что связано с недостаточным для точного описания количеством членов ряда (8). При увеличении абсолютной величины волнового вектора дырок погрешность также возрастает.

На рис. 5 приведены результаты вычислений зависимости матричных элементов переходов от волнового вектора для первых трех подзон валентной зоны и первых двух подзон зоны проводимости.

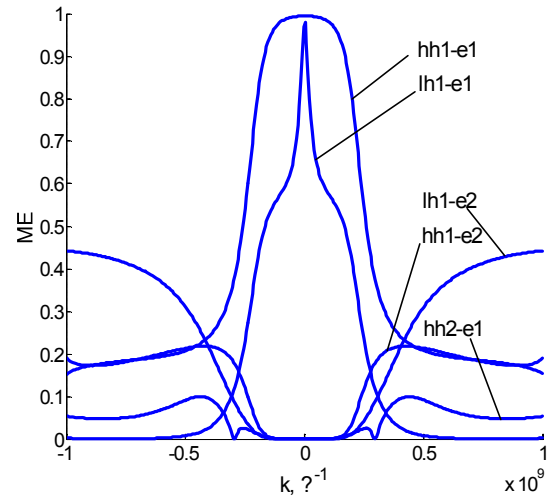


Рис. 5. Матричный элемент оптических переходов

Видно, что наиболее вероятными являются оптические переходы между подзонами с одинаковым номером. Причина заключается в ортогональности состояний соответствующих подзон. Однако разные эффективные массы и глубины потенциальных ям в зоне проводимости и валентной зоне приводят к тому, что состояния не строго ортогональны. В результате матричные элементы разрешенных переходов приблизительно равны единице, в то время как матричные элементы запрещенных переходов приблизительно равны нулю.

На рис. 6 показано семейство спектральных характеристик, полученных для различных концентраций неравновесных носителей заряда в активной области. Вычисления проводились без учета эффектов уширения линии, что позволило вскрыть тонкую структуру спектров усиления. Можно видеть слабое смещение пика усиления в коротковолновую область за счет возрастания населенности первой подзоны и дальнейшее переключение на вторую подзону. Такое поведение кривых при разных уровнях инжекции обусловлено насыщением процессов заселения в подзоне 1 и дальнейшим перемещением квазиуровней Ферми к подзоне 2.

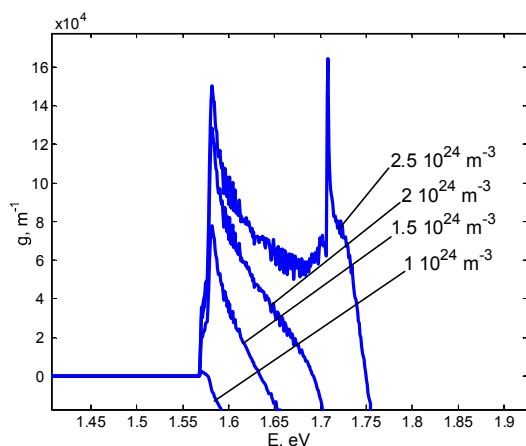


Рис. 6. Спектры оптического усиления при разных концентрациях неравновесных носителей

Выводы

Предложен и реализован новый метод вычисления зонной структуры, плотности состояний, спектров усиления полупроводниковой наногетероструктуры с одиночной квантовой ямой. Методика основана на комбинации метода матриц переноса и метода Галеркина.

Научная новизна работы заключается в использовании решений задачи Бена-Даниэля-Дюка, которые удовлетворяют граничным условиям исходной задачи, в качестве базисных функций. Вычисления оптических характеристик основаны на золотом правиле Ферми. Зонная структура вычислялась с помощью кр-метода в приближении огибающей.

Погрешность вычисления зонной структуры не превышает 2 мэВ для первых трех подзон, что позволяет получать спектры усиления с точностью, достаточной для количественного анализа.

Практическая ценность предложенного метода заключается в его незначительных требованиях к вычислительным ресурсам по сравнению с методами конечных разностей или конечных элементов. При этом метод обладает точностью, достаточной для количественного анализа.

Литература: 1. Михлин С.Г. Вариационные методы в математической физике. М.: Гостехиздат, 1957. 478 с. 2. Ghatak A.K., Thyagarajan K. and Shenoy M.R. A novel numerical technique for solving the one-dimensional Schrödinger equation using matrix approach – application to quantum well structures// IEEE J. of Quantum Electron. 1988. Vol. 24 P. 1524-1531. 3. Никольский В.В. Вариационные методы для внутренних задач электродинамики. М.: Наука. 1967. 460 с. 4. Мессия А. Квантовая механика. М: Мир. 1981. 505с. 5. Hader J. Moloney J.V. and Koch S.W. Microscopic theory of gain, absorption, and refractive index in semiconductor laser. Material influence of conduction band nonparabolicity and coulomb-induced intersubband coupling// IEEE J. of Quantum Electron. 1999. Vol. 12 P. 1878-1885. 6. Epenga R., Schuurmans M.F.H. and Colack S New kp theory for GaAs/GaAlAs-type quantum wells// Phys. Rev. B. 1987. Vol. 36. P. 1554-1564.

Поступила в редколлегию 05.07.2005

Рецензент: д-р физ.-мат. наук, проф. Свич В.А.

Клименко Михаил Васильевич, студент гр. ЛОЭ-00-1 ХНУРЭ. Научные интересы: теоритические методы исследования зонной структуры твердых тел, оптические свойства твердых тел, эффекты размерного квантования. Адрес: Украина, 61166, Харьков, пр. Ленина, 14, тел.(0572) 70-21-384 e-mail: klimenko@kture.kharkov.ua

Шулика Алексей Владимирович, ассистент каф. ФОЭТ. Научные интересы: физика полупроводниковых лазеров, физика низкоразмерных полупроводниковых гетероструктур, моделирование полупроводниковых лазеров и усилителей. Адрес: Украина, 61166, Харьков, пр. Ленина, 14, тел.(0572) 70-21-384 e-mail: shulika@kture.kharkov.ua

Сафонов Иван Михайлович, аспирант каф. ФОЭТ ХНУРЭ. Научные интересы: моделирование многослойных квантоворазмерных структур, транспортные процессы в квантоворазмерных стурктурах. Адрес: Украина, 61166, Харьков, пр. Ленина, 14, тел.(0572) 70-21-384 e-mail: i.safonov@ieee.org

Сухоиванов Игорь Александрович, д-р физ.-мат. наук, профессор ХНУРЭ. Научные интересы: волоконно-оптические технологии, элементы и системы для высокоскоростных волоконно-оптических и фотонных систем передачи информации, полупроводниковые и квантоворазмерные лазеры и усилители. Адрес: Украина, 61166, Харьков, пр. Ленина, 14, тел.(0572) 70-21-384 e-mail: sukhoivanov@kture.kharkov.ua