

MEĐUZONSKA APSORPCIJA I POJAČANJE SVETLOSTI U KVANTNOM PRSTENU

Aleksandar Sremac, Marko Živković, Milan Tadić
 Univerzitet u Beogradu, Elektrotehnički fakultet, P. fah 3554, 11120 Beograd

Sadržaj – Razvijen je jednozonski model elektronske strukture litografski definisanog GaAs kvantnog prstena. Schrödingerova jednačina je rešena razvojem talasnih funkcija u pogodan bazu. Elektronska i šupljinska stanja su izračunata za nekoliko vrednosti orbitalnog kvantnog broja. Zatim su određene zavisnosti maksimalnih vrednosti koeficijenta apsorpcije i pojačanja svetlosti od unutrašnjeg radijusa prstena. Utvrđeno je da maksimalna vrednost koeficijenta apsorpcije opada kada unutrašnji poluprečnik prstena raste i u slučaju homogenog i u slučaju nehomogenog širenja linije. Postojanje pozitivnog pojačanja je utvrđeno samo za velike vrednosti unutrašnjeg poluprečnika (većeg od 18 nm za spoljašnji poluprečnik od 30 nm), što je pripisano smanjenoj dimenzionalnosti strukture.

1. UVOD

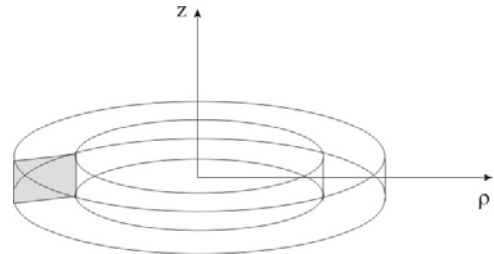
Među poluprovodničkim nanostrukturama najveću perspektivnu primenu u mikroelektronici i optoelektronici imaju kvantne žice i kvantne tačke. One se koriste za izradu ultrabrzih komponenata poput jednoelektronskih tranzistora, optičkih modulatora, lasera, itd. Kada se kvantne tačke koriste kao aktivni sloj u laserima, na primer, osobine koje one poseduju dovode do značajnog povećanja materijalnog i diferencijalnog pojačanja, pri čemu se odlike temperaturske zavisnosti optoelektronske naprave poboljšavaju. Na osnovu toga, mogućnosti primene naprava baziranih na kvantnim tačkama su velike, od upotrebe u poluprovodničkim laserima visoke snage do vrlo brzih svetlosnih izvora u fiber-optičkim sistemima za prenos podataka.

Poseban tip kvantnih tačaka su kvantni prstenovi, sa dosta potencijala u budućim primenama. Oblik kvantnog prstena zavisi od metode narastanja. Samoasemblirani kvantni prstenovi imaju oblik vulkana, dok prstenovi definisani litografskim postupkom obično imaju oblik torusa približno pravougaonog poprečnog preseka. Visina, unutrašnji i spoljašnji poluprečnik prstena variraju zavisno od metode rasta strukture i njenog sastava. Važna prednost kvantnih tačaka, pa i kvantnih prstenova u odnosu na strukture sa kvantnim jamama je u osetljivosti na upadnu svetlost. Kod struktura sa kvantnim jamama, radi apsorpcije svetlosti se mora dovesti u pravcu takvom da se polarizacija upadne svetlosti poklopi sa pravcem rasta kvantnih jama, za šta je potrebno realizovati svetlovod ili realizovati neravnu površinu strukture nagrizanjem. Kvantne tačke, pa i kvantni prstenovi kao njihov poseban oblik, su osetljivi na svetlost koja je polarizovana u ravni prstena, odnosno svetlost može biti incidentna normalno na strukturu, što je veoma lako izvesti pri konstrukciji optoelektronske komponente.

U ovom radu je razmatran GaAs kvantni prsten. Ovakvi prstenovi se izrađuju pomoću litografije i uklopljeni su u matricu od AlGaAs. Pretpostavili smo da je poprečni presek pravougaoni. Simulacijom je određena elektronska struktura i međuzonski koeficijenti apsorpcije i pojačanja. Posmatrano je homogeno i nehomogeno širenje linije i procenjen je uticaj radijalnih dimenzija na energije elektrona i šupljina.

2. MODEL

Zbog aksijalne simetrije, korišćen je cilindrični koordinatni sistem sa početkom u centru prstena, pri čemu xy -ravan polovi kvantni prsten po visini, a z -pravac je normalan na ravan u kojoj leži kvantni prsten (vidi sliku 1) [1,2].



Sl.1. Izgled modelovanog kvantnog prstena.

Koristili smo jednozonski Hamiltonijan po teoriji efektivnih masa za elektrone i u provodnoj zoni i u valentnoj zoni:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m^*} + V(\rho, z) \quad (1)$$

gde je m^* efektivna masa elektrona, a $V(\rho, z)$ neseparabilni konfinirajući potencijal koji modeluje strukturu prstena. Izbor oblika konfinirajućeg potencijala mora biti u skladu sa eksperimentalnim tehnikama rasta. U ovom radu, uzet je jednostavan pravougaoni potencijal:

$$V(\rho, z) = \begin{cases} -V_0, & R_1 \leq \rho \leq R_2, |z| \leq d \\ 0, & 0 \leq \rho \leq R_1, R_2 \leq \rho < +\infty, |z| \geq d \end{cases} \quad (2)$$

gde su R_1 i R_2 unutrašnji i spoljašnji poluprečnik, redom, a d je poluvisina prstena [3]. Ovakav oblik lateralnog potencijala je odgovarajući pri opisivanju litografski definisanih prstenova od GaAs uronjenih u poluprovodničku matricu od AlGaAs. Različite vrednosti efektivnih masa i dubine konfinirajućeg potencijala su korišćene za elektrone u provodnoj i valentnoj zoni. Efektivna masa šupljina u valentnoj zoni je dobijena na osnovu dijagonalne aproksimacije višezonskog modela i ona ima različitu vrednost u radijalnom i vertikalnom pravcu.

Na osnovu pretpostavljenog Hamiltonijana u jednačini (1) određena je elektronska struktura u prstenu, razvojem u bazu

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = \sum_i \sum_j a_{ij} \frac{\sqrt{2}}{R} \frac{1}{|J_{|l|+1}(k_{n(l)}R)|} J_l(k_{n(l)}\rho) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\varphi} \frac{1}{\sqrt{L_z}} \begin{cases} \sin(k_z z) \\ \cos(k_z z) \end{cases} \quad (3)$$

gde je R poluprečnik cilindra za ekspanziju, a_{ij} koeficijenti ekspanzije, $J_l(k_{n(l)}\rho)$ Besselova funkcija za odgovarajući

orbitalni kvantni broj l , a L_z poluvisina cilindra. Dobijena Hamiltonova matrica je dijagonalizovana pomoću programa Mathematica.

Na osnovu energija elektronskih i šupljinskih nivoa i njihovih talasnih funkcija određeni su matrice elementi prelaza, koji se za međuzonske prelaze svode na integrale preklapanja. U našem jednozonskom modelu, vrednost međuzonskih matrice elemenata optičkih prelaza ne zavisi od polarizacije upadne svetlosti. Na osnovu matrice elemenata međuzonskih prelaza određen je koeficijent apsorpcije:

$$\alpha = \frac{\pi}{n\epsilon_0 c \omega} \sum_{i,f} \left| \langle f | \frac{H_{\text{int}}}{A} | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) [f_{FD}(E_i) - f_{FD}(E_f)] \quad (4)$$

gde je $H_{\text{int}} = q\vec{v}\vec{A}$, $\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} H$. Umesto δ funkcije, pretpostavili smo homogeno širenje linije oblika Lorencijana:

$$\delta \rightarrow \frac{\Gamma/2\pi}{(E_f - E_i - \hbar\omega)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \quad (5)$$

pri čemu je Γ širina linije određena sa $\Gamma = 2\frac{\hbar}{\tau}$, gde je τ vreme relaksacije. Nehomogeno širenje linije smo modelovali Gausijanom:

$$\delta \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Gamma} e^{-\frac{(E_f - E_i - \hbar\omega)^2}{2\Gamma^2}} \quad (6)$$

gde Γ opisuje raspodelu energija usled različite veličine kvantnih prstenova u realizovanim ansamblima.

Pojačanje je određeno na osnovu izraza:

$$g = \frac{\pi}{n\epsilon_0 c \omega} \sum_{i,f} \left| \langle f | \frac{H_{\text{int}}}{A} | i \rangle \right|^2 \delta(E_i - E_f - \hbar\omega) [f_{FD}^c(E_i) - f_{FD}^v(E_f)] \quad (7)$$

Treba napomenuti da se kod pojačanja uzima razlika Fermi-Dirakovih funkcija računatih za različite kvazi-Fermijeve nivoe, jedan u provodnoj, drugi u valentnoj zoni, dok smo pri proračunu apsorpcije pretpostavili da su sva stanja u valentnoj zoni puna, a sva stanja u provodnoj zoni slobodna.

3. REZULTATI

Za vrednosti spoljašnjeg poluprečnika GaAs prstena uzeto je $R_2=30$ nm, dok je unutrašnji poluprečnik variran od 6 do 25 nm. Visina konfinirajućeg potencijala u provodnoj zoni je 250 meV, a u valentnoj zoni 135 meV. Ukoliko pretpostavimo da 65% razlike energijskog procepa pripada provodnoj zoni, ovakve vrednosti zonskih ofseta odgovaraju udelu AlAs od 0,27 u leguri AlGaAs koja čini matricu. Za referentni potencijal uzeto je dno provodne zone u materijalu matrice, pa sve dobijene diskretne vrednosti energija dole analizirane su negativne [2]. Poluvisina prstena u proračunu je $d=1$ nm, što predstavlja eksperimentalnu vrednost [1]. Elektronska struktura je izračunata za orbitalne kvantne brojeve $l = 0, \pm 1, \pm 2$. Stanja sa $+l$ i $-l$ imaju iste vrednosti energije usled kvadratne zavisnosti efektivnog potencijala od orbitalnog kvantnog broja. U proračunu za apsorpciju i pojačanje uzeta je vrednost indeksa prelamanja $n=3,6$ i vreme relaksacije $\tau=10$ ps [4]. Efektivna masa elektrona u provodnoj zoni određena je sa:

$$m^* = 0,067 \cdot m_0, \quad (8)$$

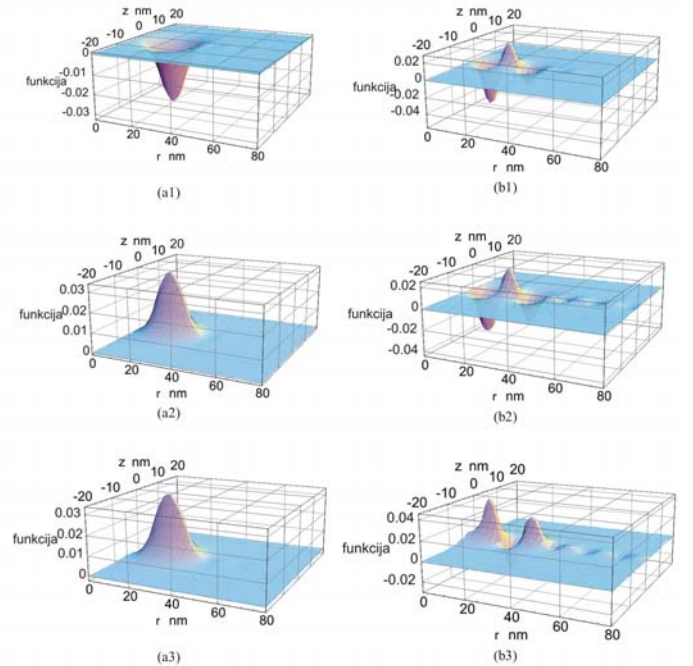
a u valentnoj zoni, u z i x -pravcu, sa:

$$m_z^* = \frac{m_0}{2,86} \quad (9)$$

$$m_x^* = \frac{m_0}{9,04}$$

respektivno, gde je m_0 masa slobodnog elektrona.

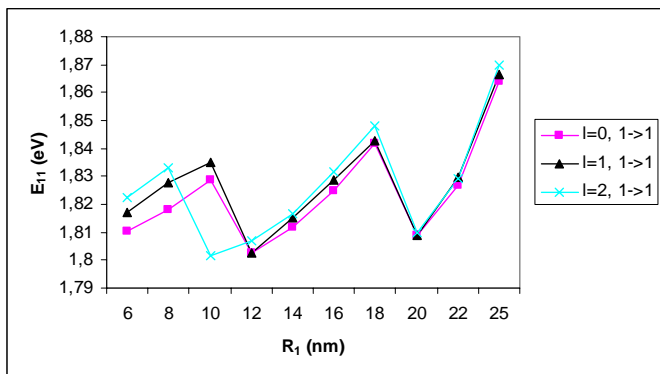
Korišćenjem navedenog metoda i ulaznih parametara, dobijene su elektronske i šupljinske talasne funkcije i energije. Sa povećanjem unutrašnjeg poluprečnika prstena dobijeni broj diskretnih stanja se smanjuje, a sva dobijena stanja su parna. Povećanje orbitalnog broja smanjuje efektivni potencijal, što dovodi do smanjenja broja nivoa. Na slici 2 su prikazani oblici talasnih funkcija osnovnih stanja u valentnoj i provodnoj zoni kvantnog prstena unutrašnjeg poluprečnika 8 nm, za tri vrednosti orbitalnog broja $l=0, \pm 1, \pm 2$. Vrednosti energija prikazanih talasnih funkcija su: -55,9 meV (za $l=2$), -61,1 meV (za $l=1$) i -63,2 eV (za $l=0$) u provodnoj zoni, odnosno -8,09 meV (za $l=2$), -8,13 meV (za $l=1$) i -0,19 eV (za $l=0$) ispod vrednosti -1,880 eV u valentnoj zoni. Prema obliku potencijala, kvantni prsten bi trebalo da konfinira značajnije stanja sa većom vrednošću orbitalnog broja. Činjenica da je osnovno stanje i za elektrone i za šupljine sa kvantnim brojem $l=0$ indicira jak uticaj doprinosa kinetičkog člana svojstvenoj



Sl.2. Oblici talasnih funkcija stanja sa najnižom energijom za različito l . (a1-a3) stanja u provodnoj zoni: (a1) $l=2$, (a2) $l=1$, (a3) $l=0$. (b1-b3) stanja u provodnoj zoni: (b1) $l=2$, (b2) $l=1$, (a3) $l=0$.

energiji. Razlika u obliku funkcija u provodnoj i valentnoj zoni može se objasniti različitim vrednostima efektivnih masa u odnosu na provodnu zonu, zatim različitim efektivnim masama u ρ i z pravcu, kao i različitim zonskim ofsetom u valentnoj i provodnoj zoni. Različita lokacija maksimuma talasnih funkcija stanja u provodnoj i valentnoj zoni *a priori* smanjuje vrednosti matričnih elemenata.

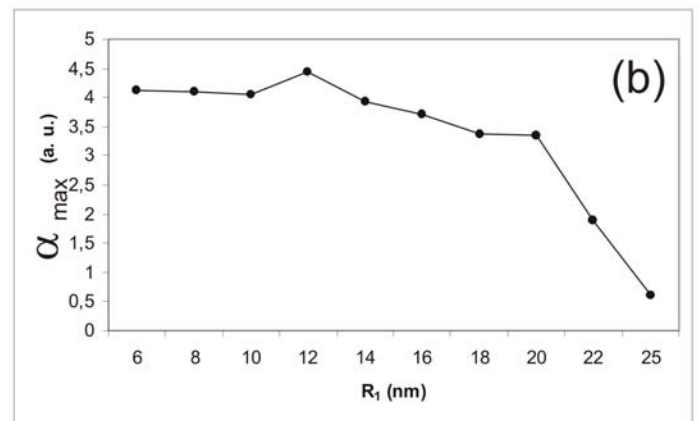
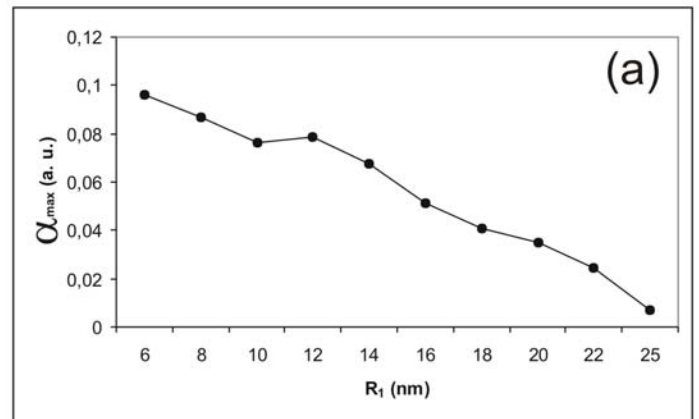
Koristeći vrednosti svojstvenih energija elektrona i šupljina izračunate su energije međuzonskih prelaza. Na slici 3 prikazane su zavisnosti energija prelaza između osnovnih stanja u valentnoj i provodnoj zoni za tri ispitane vrednosti l . S obzirom da u aksijalno simetričnim strukturama selekciono pravilo dozvoljava međuzonske prelaze između stanja istog orbitalnog broja, samo su energije za ovakve prelaze prikazane na dijagramu. Velika osetljivost energija prelaza na promenu unutrašnjeg radijusa i kvazioscilarne zavisnosti su posledica međusobno suprotstavljenih uticaja orbitalnog momenta i konfinirajućeg potencijala. Kao posledica različitih efektivnih masa i zonskih ofseta, energije osnovnih stanja za različito l u provodnoj i valentnoj zoni se međusobno udaljavaju i približavaju sa rastom unutrašnjeg poluprečnika. Pri manjim vrednostima unutrašnjeg radijusa najniža energija prelaza je za $l=0$, ali za veće vrednosti R_1 osnovno stanje sistema ima $l=2$. Međutim, za unutrašnji radijus veći od 20 nm energije sva tri osnovna stanja za različito l su veoma bliske.



Sli.3. Energije međuzonskih prelaza između osnovnih stanja u valentnoj i provodnoj zoni u zavisnosti od unutrašnjeg poluprečnika, za svako l , pri temperaturi $T=70K$.

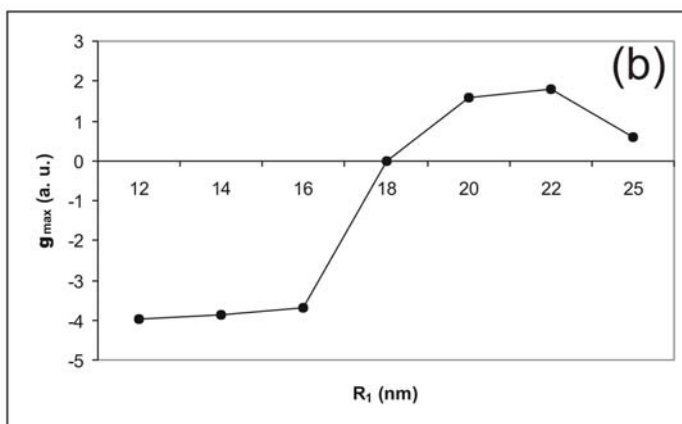
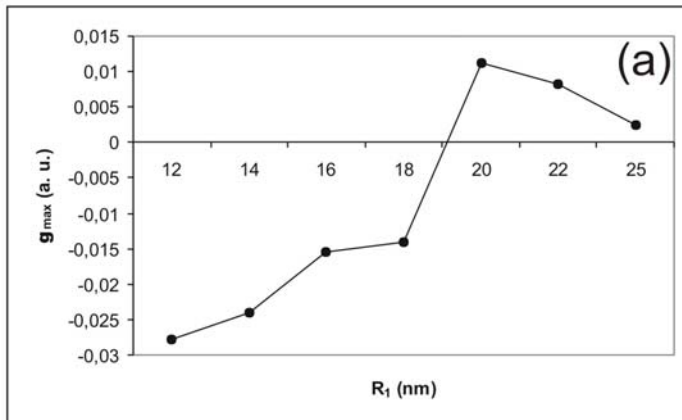
Kao posledica promene oblika talasnih funkcija pri promeni unutrašnjeg radijusa menja se maksimalna vrednost koeficijenta apsorpcije. Na slici 4 je prikazana zavisnost maksimuma koeficijenta međuzonske apsorpcije od unutrašnjeg radijusa pri nehomogenom širenju (slika 4a) i pri homogenom širenju (slika 4b) pri temperaturi $T=70$ K. Pri nehomogenom širenju zavisnost maksimuma koeficijenta apsorpcije od unutrašnjeg poluprečnika je skoro linearno opadajuća kriva, dok je pri homogenom širenju kriva blago opadajuća za vrednosti unutrašnjeg poluprečnika od 6 do 20 nm. Ovakav oblik krive za nehomogeno širenje znači da je promena matričnih elemenata preklapanja vrlo mala, dok je linearno opadanje kod nehomogenog širenja posledica povećanog razmaka između

energijskih nivoa koji doprinose jedinstvenom piknu apsorpcione krive, kao i smanjenja broja nivoa sa rastom unutrašnjeg poluprečnika.



Sli.4. Zavisnost maksimuma koeficijenta apsorpcije pri međuzonskim prelazima od unutrašnjeg radijusa kvantnog prstena pri temperaturi $T=70K$: (a) nehomogeno širenje, (b) homogeno širenje

Kao za apsorpciju, odredili smo zavisnost pojačanja od unutrašnjeg poluprečnika prstena, prikazanu na slici 5. Ovde se uočava rast pojačanja sa porastom unutrašnjeg poluprečnika, kao i postojanje pozitivnih vrednosti za $R_1 > 18$ nm. Maksimalno koeficijenta pojačanja za homogeno širenje linije je za unutrašnji poluprečnik $R_1=22$ nm, a za nehomogeno širenje maksimalna vrednost postoji za $R_1=20$ nm. Sa daljim rastom R_1 , pojačanje opada. Rast pojačanja za male vrednosti R_1 je posledica smanjenja dimenzionalnosti sa rastom unutrašnjeg poluprečnika, koji omogućava odgovarajuću populaciju gornjeg i donjeg laserskog nivoa. Opadanje pojačanje za veće vrednosti R_1 je posledica smanjenog preklapanja talasnih funkcija stanja u valentnoj i provodnoj zoni između kojih se dešavaju prelazi. Rezultati našeg proračuna ukazuju da se pozitivne vrednosti pojačanja mogu postići samo u relativno tankim prstenovima (reda 10 nm), kao i da postoji optimalna vrednost unutrašnjeg poluprečnika, tj vrednost za koju je pojačanje maksimalno. Osim toga, ispitili smo uticaj temperature na pojačanje i konstatovali da donja vrednost unutrašnjeg poluprečnika pri kojoj je pojačanje pozitivno opada sa smanjenjem temperature. Zavisnost α_{max} i g_{max} od T nisu prikazani u ovom radu.



Sl.5. Zavisnost maksimuma koficijenta pojačanja pri međuzonskim prelazima od unutrašnjeg radijusa kvantnog prstena za temperaturu $T=4K$: (a) nehomogeno širenje, (b) homogeno širenje.

4. ZAKLJUČAK

Teorijski su razmatrani elektronska struktura i međuzonski optički prelazi u GaAs kvantnim prstenovima. Maksimum koficijenta međuzonske apsorpcije pri homogenom širenju pokazuje postojanje platoa za $R_1 < 20$ nm u zavisnosti od unutrašnjeg radijusa, dok je pri nehomogenom širenju zavisnost približno linearno opadajuća kriva. Povećanjem unutrašnjeg poluprečnika kvantnog prstena menja se raspored energijskih stanja u prstenu i dolazi do smanjenja maksimuma apsorpcije, prevashodno zbog smanjenja broja konfiniranih stanja u prstenu i smanjenja preklapanja između stanja koja

učestvuju u prelazima. Dobijeni rezultati modelovanja GaAs kvantnog prstena ukazuju da optičke osobine značajno zavise od radijalnih dimenzija prstena.

LITERATURA

- [1] Planelles, J., Jaskolski, W., Aliaga, J. I., *Energy structure of quantum rings in magnetic field*, *Physical Review B*, Vol. 65, 033306, (2001).
- [2] Barticevic, Z., Pacheco, M., Latge, A., Quantum rings under magnetic fields: Electronic and optical properties, *Physical Review B*, Vol. 62, pp.6963-6966, (2000).
- [3] Li, S. and Xia, J., Electronic states of InAs/GaAs quantum ring, *Journal of Applied Physics*, Vol. 89, pp.3434-3437, (2001).
- [4] Vurgaftman, I. and Meyer, J. R., Band parameters for III-IV compound semiconductors and their alloys, *Journal of Applied Physics*, Vol. 89, pp.5815-5875, (2001).
- [5] Halonen, V., Pietilainen, P., Chakraborty, T., Optical-absorption spectra of quantum dots and rings with a repulsive scattering centre, *Europhys. Lett.*, 33 (5), pp. 377-382 (1996).
- [6] Ikonić, Z., Milanović, V., *Poluprovodničke kvantne mikrostrukture*, Univerzitet u Beogradu, (1997).

Abstract – The single band model for the electronic structure of lithographically defined GaAs quantum ring is developed. Schrödinger equation is solved by expanding the wavefunctions into the appropriate basis. The electron and hole states are computed for a few values of the orbital angular momentum. Coefficients of absorption and gain are computed as they depend on the inner radius of the quantum ring. Both for the homogeneous and inhomogeneous line broadening the maximum absorption coefficient is found to decrease when the inner radius increases. The optical gain is found to be positive only for large values of the inner radius (larger than 18 nm for the outer radius equal to 30 nm), which is attributed to the decreased dimensionality of the structure.

INTRABAND OPTICAL ABSORPTION AND GAIN IN QUANTUM RING

Aleksandar Sremac, Marko Živković, Milan Tadić