

## ТЕОРІЯ МЕЖЗОННОГО ПОГЛИНАННЯ У КВАНТОВИХ ЯМАХ ЯКІ БАЗУЮТЬСЯ НА МАТЕРІАЛАХ З АНІЗОТРОПНИМИ НЕПАРАБОЛІЧНИМИ ЗОНАМИ

Турова І.С., Івашина Ю.К.

Херсонський державний університет

Після створення перших квантових каскадних лазерів і детекторів (біля 20 років тому) кількість експериментальних робіт, у яких вивчалися фізичні процеси в цих наноприладах, щорічно збільшується, хоча виконуються вони лише в наукових установах тих країн, де є високорозвинена технологічна база з устаткуванням молекулярно-променевої епітаксії. Незважаючи на те, що високу вартість створення квантових каскадних лазерів і детекторів, їх ексклюзивні фізико-технічні характеристики постійно приваблюють увагу дослідників до вивчення умов покращення функціонування й оптимізації робочих параметрів цих наноприладів.

Квантова яма (КЯ) - плоска напівпровідникова гетероструктура, в якій тонкий шар напівпровідника з вузькою забороненою зоною записаний між двома напівпровідниками з широкою забороненою зоною таким чином, щоб забезпечити розмірне квантування електронних рівнів [1].

Важливість впливу непараболічності зон на правила відбору та на значення сили осцилятора КЯ було показано [3, 4] та в ряді інших робіт. Проте, існують багато напівпровідників (безщілинні II-V та одноіменно деформовані III-V матеріали, напівпровідники зі структурою халькопїриту) які характеризуються не тільки суттєвою непараболічністю енергетичного спектру, але також енергетично залежною анізотропією електронних та діркових енергетичних зон унаслідок одноісної симетрії цих кристалів.

**Мета дослідження** полягає в узагальненні теорії оптичного поглинання в квантових ямах шляхом врахування як анізотропії так й непараболічності електронного зонного спектра та у відстеженні специфічних рис крайового фундаментального поглинання в таких системах.

Для досягнення цієї мети були поставлені такі **завдання**:

- здійснити аналіз літератури з теми дослідження;
- отримати та проаналізувати закон дисперсії електронів в актуальних з точки зору оптичного поглинання підзонах розмірного квантування;
- в межах метода обвідних функцій дістати аналітичні вирази для хвильових функцій електронів;
- отримати вирази для уявної частини діелектричної функції у випадках поздовжньої та поперечної поляризації електромагнітних хвиль;
- розрахувати та проаналізувати форму краю смуги фундаментального поглинання для різних товщин квантових ям на основі арсеніду кадмію ( $Cd_3As_2$ ).

В цій статті буде побудовано теорію оптичного поглинання в прямокутних нескінченно глибоких КЯ, що базуються на таких матеріалах. Для досягнення цієї мети можна скористатися модифікованою версією восьмизонної моделі Кейна (так зване квазікубічне наближення) котра добре зарекомендувала себе під час опису електронних властивостей напівпровідників цього типу. Чисельні розрахунки робляться для арсеніду кадмію ( $Cd_3As_2$ ) - тривимірний напівметал Дірака з унікальними властивостями [2, 5].

Було отримано дисперсійне рівняння (1), яке описує чотири множини підзон з різними значеннями квантового числа  $n$  двократно вироджені при довільній величині  $k_{\perp}$ : підзони провідності ( $c$ ), підзони важких дірок ( $j = 1$ ), підзони легких дірок ( $j = 2$ ) та спів-орбітально розщеплені зони ( $j = 3$ ):

$$\gamma(\varepsilon) = f_1(\varepsilon)k_{\perp}^2 + f_2(\varepsilon)k_n^2. \quad (1)$$

Знання енергетичної структури підзон та хвильових функцій дозволяє вивести вираз для уявної частини діелектричної проникності, яка відповідальна за оптичне поглинання в кристалах. У випадку прямих оптичних переходів загальна формула для неї має вигляд:

$$\epsilon_i(\omega) = \frac{\pi e^2}{\epsilon_0 m_0^2 \omega^2 V} \times \sum_{n,m} |\langle n | \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{p}} | m \rangle|^2 (f(\epsilon_m) - f(\epsilon_n)) \delta(\epsilon_n - \epsilon_m - \hbar\omega) \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}, \quad (2)$$

де  $\mathbf{u}$  – вектор поляризації електромагнітної хвилі;  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$  – векторний оператор імпульсу;  $f(\epsilon)$  – функція Фермі-Дірака;  $\delta(\epsilon_n - \epsilon_m - \hbar\omega)$  – дельта-функція.

На рисунку наведено результати числових розрахунків залежності  $I_{\perp\perp}(\epsilon_{ph})$  у випадку поперечної поляризації електромагнітної хвилі для товщин двовимірного шару:  $a = 10 \text{ nm}$  та  $a = 50 \text{ nm}$  відповідно. Аналіз наведених кривих показує, що абсолютно переважний внесок в прикорйове оптичне поглинання дають переходи між підзонами важких дірок та підзонами провідності. Поглинання обумовлене переходами із підзон легких дірок та спин-орбітально відщеплених підзон є порівняно настільки слабким, що ним можна знехтувати.

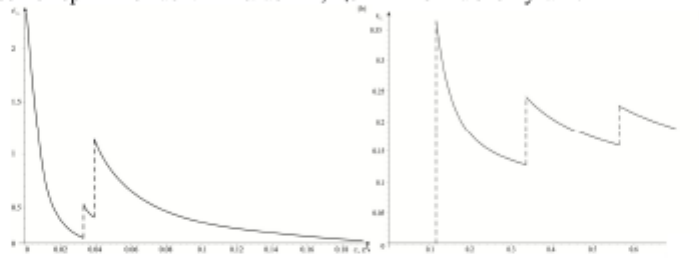


Рис.1. Залежності  $I_{\perp\perp}(\epsilon_{ph})$  для товщин двовимірного шару: а)  $a = 10 \text{ nm}$  б)  $a = 50 \text{ nm}$

Серед пріоритетних **результатів**, які були отримані у ході дослідження принциповий характер мають наступні:

1. У межах квазікубічного наближення отримано дисперсійне рівняння та хвильові функції станів електронів, які описують ефекти непараболічності і анізотропії енергетичних підзон у квантових ямах для випадку коли нормаль до двовимірного шару співпадає за напрямком з головною віссю кристалу.
2. Отримано аналітичний вираз для уявної частини діелектричної функції для квантових ям в межах квазікубічного наближення для двох взаємно перпендикулярних поляризацій світла.
3. Теоретично досліджені особливості міжзонного поглинання в квантових ямах на основі арсеніду кадмію для різних товщин двовимірного шару. Показано, що абсолютно переважний внесок в прикорйове оптичне поглинання дають переходи між підзонами важких дірок та підзонами провідності. Поглинання обумовлене переходами із підзон легких дірок та спин-орбітально відщеплених підзон є порівняно настільки слабким, що ним можна знехтувати.

#### Література:

1. Квантова яма [Електронний ресурс]. Режим доступу: [http://uk.wikipedia.org/wiki/Квантова\\_яма](http://uk.wikipedia.org/wiki/Квантова_яма)
2. Arushanov E.K. II, V<sub>2</sub> compounds and alloys // Prog. Cryst. Growth Charact. – 1992. – v. 25. – P. 131-201.
3. Bazhenov N.L. Optical transitions in Cd<sub>x</sub>Hg<sub>1-x</sub>Te-based quantum wells and their analysis with account for the actual band structure of the material Semiconductors / N.L. Bazhenov, A.V. Shilyaev, K.D.Mynbaev, G.G. Zegrya. June 2012, Volume 46, Issue 6, pp 773-778
4. Liu W., Zhang D. H., Fan W. J. Modeling of intersubband transitions in quantum well infrared photodetectors with complex potential profiles Optical and Quantum Electronics September 2006, Volume 38, Issue 12-14, pp. 1101-1106
5. Neupane M., Xu SY, Sankar R., Alidoust N., Bian G., Liu C., Belopolski I, Chang TR., Jeng HT., Lin H., Bansil A., Chou F., Hasan MZ. Observation of a three-dimensional topological Dirac semimetal phase in high-mobility Cd3As2. Nat Commun. 2014 May 7