

Borde de electroabsorción en pozos cuánticos

C. Trallero Giner. Departamento de Física Teórica, Facultad de Física, Universidad de La Habana

RESUMEN

Se calcula el coeficiente de electroabsorción en un pozo cuántico rectangular infinito. Se analiza la dependencia de la parte imaginaria de la constante dieléctrica con la dirección del campo eléctrico respecto a la interfase del pozo cuántico.

ABSTRACT

Electroabsorption coefficient in a rectangular infinite quantum well is obtained. The imaginary part of the dielectric constant and its dependence with the electric field direction respect to quantum well interfase is study.

INTRODUCCIÓN

Los niveles discretos de energía producto del confinamiento en estructuras semiconductoras como pozos cuánticos (PC), láminas delgadas, heteroestructuras de capas, etcétera, son de gran importancia en la descripción de diferentes fenómenos de transportes y de las propiedades ópticas y eléctricas de estos sistemas. Recientemente, diferentes autores han estudiado la influencia de un campo eléctrico constante F sobre las propiedades ópticas de los PC. La aplicación de un campo eléctrico en la dirección de cuantización espacial (sea, por ejemplo el eje Z) es de interés en la optoelectrónica para la construcción de dispositivos electro-ópticos que sirven como moduladores.

Mediciones de electroreflectancia [1,2] y fotoluminiscencia [3,4] en pozos cuánticos de $\text{GaAs} - \text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ muestran un corrimiento hacia el

rojo en la posición de los picos, relacionados directamente con el incremento del campo eléctrico. Wood y otros [5] obtuvieron resultados similares en PC múltiples de GaAs-Ga_{0,68}Al_{0,32}As mediante mediciones de electroabsorción a temperatura ambiente. Diferentes trabajos teóricos fueron dedicados a la explicación del corrimiento energético de los picos que aparecen tanto en la absorción y reflectancia óptica como en la fotoluminiscencia en PC de GaAs-AlGaAs cuando se aplica un campo eléctrico perpendicular a las capas (vea [6-11]).

Hasta el presente no se han obtenido expresiones explícitas para las constantes ópticas en el borde de absorción para los sistemas que conforman los pozos cuánticos. El presente trabajo está destinado al cálculo del coeficiente de electroabsorción en los casos en que el campo eléctrico aplicado F sea perpendicular ($F \parallel Z$) o paralelo a la interfase de un pozo cuántico infinito. En la sección II se presentan las funciones de onda y los niveles de energía como función del campo eléctrico. La Sección III se dedica al cálculo del coeficiente de electroabsorción. Los resultados fundamentales se resumen en la sección IV.

II. FUNCIONES DE ONDA

a) Campo eléctrico F perpendicular a la interfase ($F \parallel Z$). Consideremos un pozo cuántico rectangular infinito descrito por un modelo parabólico en presencia de un campo eléctrico constante F perpendicular a la interfase. En el marco de la aproximación de la ecuación de masa efectiva el hamiltoniano de un electrón en la banda de conducción tiene la forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_c} \nabla^2 + |e|Fz \right] \psi^c = (E^c - E_g) \psi^c; \quad 0 < z < d, \quad (1)$$

donde E_g es el gap del semiconductor, m_c es la masa efectiva del electrón de conducción y d es el ancho del pozo. Las autofunciones de (1) (vea [8,9]) son:

$$\psi_n^c = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y}} e^{i\vec{k}_c \cdot \vec{r}} \phi_n^c(z), \quad (2)$$

siendo los vectores \vec{k}_c y \vec{r} el cuasimomento y el vector de posición respectivamente del electrón en el plano de la interfase, L_x y L_y son las dimensiones de dicha interfase.

$$\phi_n^c(z) = \pi \sqrt{\frac{a_c}{d}} \frac{Bi\left(-\frac{\epsilon_n^c}{\hbar w_c}\right) Ai(\xi_n) - Ai\left(-\frac{\epsilon_n^c}{\hbar w_c}\right) Bi(\xi_n)}{\left[1 - Ai^2\left(-\frac{\epsilon_n^c}{\hbar w_c}\right) / Ai^2\left(\frac{a_c - \epsilon_n^c}{\hbar w_c}\right)\right]^{1/2}} \quad (3)$$

$$\xi_n = \frac{z}{d} a_c - \frac{\epsilon_n^c}{\hbar w_c}; \quad a_c = \pi \sqrt{\frac{\hbar w_c}{E_{0c}}}; \quad w_c = \frac{(eF)^{3/2}}{(2m_c \hbar)^{1/2}}$$

$$E_{oc} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_c d^2}; \quad \epsilon^c = E^c - E_g - \frac{\hbar^2 K_c^2}{2m_c} \quad (4)$$

En (3) $Ai(x)$ y $Bi(x)$ son las funciones de Airy definidas por [12]

$$Ai(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{u^3}{3} + xu\right) du, \quad (5)$$

$$Bi(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \left[\sin\left(\frac{u^3}{3} + xu\right) + \exp\left(-\frac{u^3}{3} + xu\right) \right] du \quad (6)$$

Los autovalores ϵ_n^c se determinan mediante la ecuación [8,9]

$$Ai\left(-\frac{\epsilon_n^c}{\hbar w_c}\right) Bi\left(a_c - \frac{\epsilon_n^c}{\hbar w_c}\right) - Bi\left(-\frac{\epsilon_n^c}{\hbar w_c}\right) Ai\left(a_c - \frac{\epsilon_n^c}{\hbar w_c}\right) = 0 \quad (7)$$

Para el caso de un hueco en la banda de valencia las expresiones (2) y (7) toman la forma

$$\psi_n^v = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y}} e^{i\vec{k}_v \cdot \vec{r}} \phi_n^v(z), \quad (8)$$

$$\phi_n^v(z) = \pi \sqrt{\frac{a_v}{d}} \frac{Bi\left(-\frac{\epsilon_n^v}{\hbar w_v}\right) Ai(\eta_n) - Ai\left(-\frac{\epsilon_n^v}{\hbar w_v}\right) Bi(\eta_n)}{\left[Ai^2\left(-\epsilon_n^v/\hbar w_v\right) / Ai^2\left(-\epsilon_n^v/\hbar w_v - a_v\right) - 1 \right]^{\frac{1}{2}}} \quad (9)$$

$$Ai\left(-\frac{\epsilon_n^v}{\hbar w_v}\right) Bi\left(-\frac{\epsilon_n^v}{\hbar w_v} - a_v\right) - Bi\left(-\frac{\epsilon_n^v}{\hbar w_v}\right) Ai\left(-\frac{\epsilon_n^v}{\hbar w_v} - a_v\right) = 0, \quad (10)$$

siendo

$$\epsilon_n^v = E^v + \frac{\hbar^2 K_v^2}{2m_v}; \quad \eta = -\frac{\epsilon_n^v}{\hbar w_v} - \frac{a_v}{d} z, \quad (11)$$

y las variables w_v y a_v son obtenidas de (4) mediante la sustitución de m_c por m_v (masa efectiva del hueco).

b) Campo eléctrico paralelo a la interfase ($F \perp Z$)

Consideremos el campo según la dirección del eje x . En este caso la ecuación de masa efectiva de un electrón en la banda de conducción será

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_c} \nabla^2 + |e|F x \right] \psi^c = (E^c - E_g) \psi^c; \quad 0 < z < d. \quad (12)$$

El confinamiento del electrón según la dirección Z produce un conjunto de sub-bandas con energías $E_n^c = E_g + E_{oc} n^2 + \frac{\hbar^2 K_{yc}^2}{2m_c}$

En cada una de estas sub-bandas el electrón se moverá libremente según el eje Y, mientras que su movimiento en la dirección X estará modulado por la acción del campo eléctrico. Así la función de onda de un electrón en la sub-banda n tendrá la forma

$$\psi_n^c = \frac{e^{iK_{yc}Y}}{\sqrt{I_y}} \sqrt{\frac{2}{d}} \sin \frac{n\pi}{d} z \frac{1}{\sqrt{\pi \hbar \omega_c \ell_c}} \text{Ai} \left[\frac{X}{\ell_c} - \frac{\epsilon_n^c}{\hbar \omega_c} \right], \quad (13)$$

donde
$$\epsilon_n^c = E^c - E_g - \frac{\hbar^2 K_{yc}^2}{2m_c} - E_{oc} n^2, \quad (14)$$

$$\ell_c = \left(\frac{\hbar^2}{2m_c eF} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (15)$$

Las expresiones (13) y (14) se generaliza fácilmente al caso de un hueco en la banda de valencia. De este modo la función de onda será

$$\psi_n^v = \frac{e^{iK_{yv}Y}}{\sqrt{I_y}} \sqrt{\frac{2}{d}} \sin \frac{\pi n}{d} z \frac{1}{\sqrt{\pi \hbar \omega_v \ell_v}} \text{Ai} \left[-\frac{X}{\ell_v} - \frac{\epsilon_n^v}{\hbar \omega_v} \right], \quad (16)$$

con

$$\epsilon_n^v = E^v + \frac{\hbar^2 K_{yv}^2}{2m_v} + E_{ov} n^2$$

y ℓ_v se obtiene de (15) mediante la sustitución de m_c por m_v .

III. COEFICIENTE DE ABSORCIÓN

El coeficiente de absorción se encuentra relacionado con la parte imaginaria de la constante dieléctrica ϵ_2 mediante la expresión

$$\alpha = \frac{\omega}{n_0 c} \epsilon_2 \quad (17)$$

donde n_0 es el índice de refracción del medio c- la velocidad de la luz y ω - frecuencia de la radiación incidente. Si se considera un semiconductor donde la banda de valencia se encuentra totalmente llena de electrones, mientras que la banda de conducción está vacía, ϵ_2 está vinculado con la probabilidad de transición por unidad de tiempo W_{cv} a través de la fórmula

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{n}{N\omega} W_{cv} \quad (18)$$

siendo N el número de fotones por unidad de volumen,

$$W_{cv} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum |P_{cv}|^2 \delta(\hbar\omega - E^c + E^v) \quad (19)$$

$$P_{cv} = \langle \phi_c | \frac{e}{mc} \vec{A} \cdot \vec{p} | \phi_v \rangle, \quad (20)$$

donde \vec{A} es el valor potencial de la radiación electromagnética, el cual viene expresado por

$$\vec{A} = A_0 \frac{\hat{e}}{r} e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)},$$

$$A_0 = \sqrt{\frac{2\pi N \hbar \omega}{n^2 V}} \quad (21)$$

En (20) ϕ_c y ϕ_v son las funciones de onda de los estados electrónicos en las bandas de conducción o de valencia respectivamente. Es decir, es producto de los estados de Bloch por las correspondientes autofunciones del hamiltoniano en la aproximación de masa efectiva presentadas en el epígrafe anterior.

La expresión de la parte imaginaria de la constante dieléctrica ϵ_2 dependerá de la dirección del campo eléctrico con respecto a la interfase, así tendremos:

a) Campo eléctrico perpendicular a la interfase.

En este caso haciendo uso de las funciones de onda (2) y (8) obtenemos para el elemento matricial P_{cv} la expresión

$$P_{cv} = \frac{e}{mc} A_0 (\hat{e} \cdot \vec{p}_{cv}) \delta(\vec{k}_c - \vec{k}_v) \int_0^d \phi_n^c(z) \phi_m^v(z) dz, \quad (22)$$

donde \vec{p}_{cv} es el vector de momento entre los estados de Bloch $U_{c,0}(\vec{r})$ y $U_{v,0}(\vec{r})$. En la obtención de (22) se hizo uso de la aproximación de masa efectiva donde los elementos matriciales del momento \vec{p}_{cv} son independientes de \vec{k} y se supone que las transiciones electrónicas entre la banda de valencia y de conducción son permitidas.

Sustituyendo (22) en (19) se obtiene finalmente que

$$\epsilon_2(\omega, F) = \frac{B \theta^{\frac{1}{2}}}{\omega^2} \sqrt{\frac{E_0}{\hbar \theta}} \sum_{n,m} |M_{n,m}|^2 \theta(-\eta - \frac{\epsilon_n^c - \epsilon_m^v}{\hbar \theta}), \quad (23)$$

siendo

$$B = \frac{2 e^2 |\hat{e} \cdot \vec{p}_{cv}|^2}{m^2 \hbar} \left(\frac{8\mu^3}{\hbar^3} \right)^{\frac{1}{2}}; E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu d^2} \quad (24)$$

$$n = \frac{Eg - \hbar\omega}{\hbar\theta} ; \mu^{-1} = m_c^{-1} + m_v^{-1} ; \theta = \left(\frac{e^2 F^2}{2\mu\hbar} \right)^{1/2}$$

$$|M_{n,m}|^2 = \left| \int_0^d \varphi_n^C(z) \varphi_m^V(z) dz \right|^2 \quad (25)$$

Se puede probar que en una estructura cuasibidimensional la parte de la constante dieléctrica ϵ_2 para $F = 0$ está dada por [13]

$$\epsilon_2(\omega, 0) = \frac{B\theta^{\frac{1}{2}}}{\omega^2} \frac{E_0}{\hbar\theta} \sum_n \theta \left(-\eta - \frac{E_0}{\hbar\theta} n^2 \right) \quad (26)$$

Usando (23) y (26) podemos calcular el cambio

$$\Delta\epsilon_2(\omega, F) = \epsilon_2(\omega, F) - \epsilon_2(\omega, 0) = \frac{B\theta^{\frac{1}{2}}}{\omega^2} F^{\frac{1}{2}} F_2''(\eta) \quad (27)$$

donde

$$F_2''(\eta) = \sqrt{\frac{E_0}{\hbar\theta}} \sum_{n,m} \left\{ |M_{n,m}|^2 \theta \left(-\eta - \frac{E_0}{\hbar\theta} n^2 \right) - \delta_{n,m} \theta \left(-\eta - \frac{E_0}{\hbar\theta} n^2 \right) \right\} \quad (28)$$

es la función electroóptica en la aproximación de masa efectiva en el caso de que el campo esté perpendicular a la interfase. $F_2''(\eta)$ representa el cambio en ϵ_2 producto del campo en un borde de absorción con un punto crítico M_0 .

b) Campo eléctrico paralelo a la interfase.

Partiendo de las funciones de onda (13), (16) y de (19) se puede ver que $\epsilon_2(\omega, F)$ toma la forma

$$\epsilon_2 = \frac{4e^3 |\hat{e} \cdot \vec{p}_{cv}|^2 F}{m^2 d \omega^2 (\hbar\theta)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_n \int \frac{dy}{\sqrt{y}} A_{i_1}^2 \left[y + \frac{E_0 n^2 + Eg - \hbar\omega}{\hbar\theta} \right] \quad (29)$$

La integral indicada en la parte derecha de (29) se puede evaluar teniendo en cuenta que la función A_{i_1} cumple con la propiedad [14]

$$\int_0^\infty \frac{dt}{\sqrt{t}} A_{i_1}(u+t) = \frac{1}{2} A_{i_1} \left(2^{\frac{2}{3}} u \right) \quad (30)$$

donde

$$A_{i_1}(Y) = \int_0^\infty dt A_i(t) \quad (31)$$

Finalmente se obtiene que

$$\epsilon_2(\omega_1, F) = \frac{B\theta^{\frac{1}{2}}}{\omega^2} \sum_n \frac{E_0}{\hbar\theta} A_{i_1} \left[2^{\frac{2}{3}} \left(\eta + \frac{E_0}{\hbar\theta} n^2 \right) \right] \quad (32)$$

y la diferencia de ϵ , producto del campo será igual a

$$\Delta\epsilon_2(\omega, F) = \frac{B\theta^2}{\omega^2} F_2^{\perp}(\eta), \quad (33)$$

donde

$$F_2^{\perp}(\eta) = \sum_n \frac{E_0}{\hbar\theta} \left\{ A_i \left[2^{\frac{2}{3}} \left(\eta + \frac{E_0}{\hbar\theta} n^2 \right) \right] - \theta \left(-\eta - \frac{E_0}{\hbar\theta} n^2 \right) \right\}, \quad (34)$$

es la función electroóptica para cuando F es perpendicular a Z en un punto crítico del tipo M_0 .

IV. DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS

En la figura 1 se muestra la dependencia de la función electroóptica F_2^{\perp} en términos del parámetro adimensional η . Cuando F se encuentra en la dirección perpendicular a la interfase del P.C., o lo que es lo mismo $F \parallel Z$, la influencia del campo eléctrico consiste en correr los niveles energéticos de los electrones de conducción y de los huecos de valencia con respecto a la ley $E_0 n^2$ del pozo infinito. La asimetría que introduce el campo en las funciones de onda determina que se rompa la regla de selección $\Delta n=0$ en el caso de $F=0$, esto último permite transiciones entre todos los niveles de conducción y de valencias con un peso o contribución a la absorción igual a $|M_{n,m}|^2$. Como se observa en la figura 1 y de la fórmula (28) las nuevas transiciones vienen dadas por la ley

$$\hbar\omega_{n,m} = E_g + \epsilon_n^C(F) - \epsilon_m^V(F), \quad (35)$$

mientras que para $F = 0$ tendremos transiciones para energías

$$\hbar\omega_n = E_g + E_0 n^2 \quad (36)$$

Estas diferencias explican las oscilaciones de la parte imaginaria de la constante dieléctrica en un P.C. cuando el campo es perpendicular a la interfase.

El caso de F paralelo a la interfase se muestra en la figura 2 a través de la función electroóptica F_2^{\parallel} . Aquí la influencia del campo se traduce al movimiento en el plano perpendicular al eje Z de modo que los niveles de energía en el pozo cuántico no se alteran. Esto determina que los P.C., se pueden considerar como una superposición de sistemas estrictamente bidimensionales cada uno de los cuales tiene un gap efectivo $E_{ge} = E_g + E_0 n^2$.

La variación de la parte imaginaria de la constante dieléctrica para una estructura bidimensional es igual a [15]

$$\Delta\epsilon_2(\omega, F) = \frac{B\theta^2}{\omega^2} \frac{E_0}{\hbar\theta} \left(\frac{dk_z}{2\pi} \right) F_2^{\parallel}(\eta), \quad (37)$$

donde

$$F_2(\eta) = \int_{\eta}^{\infty} A_1(t) dt - \theta(-\eta) \quad (38)$$

y K_z es el corte en el espacio de las k

En las figuras 1 y 2 se muestra el gráfico de la función electroóptica bidimensional $F_2(\eta)$. Como puede observarse dicha función presenta una caída exponencial para $\eta < E_g$ y un comportamiento oscilatorio si $\eta > E_g$, conocidas como las oscilaciones de Franz-Keldysh. Si se comparan las fórmulas (33) y (37) se observa que la electroabsorción para un P.C. es una combinación de funciones del tipo (34) sustituyendo E_g por el gap efectivo E_{ge} . Este análisis explica el comportamiento de la función $\Delta\epsilon_2(\omega, F)$, en donde cada transición entre las diferentes sub-bandas de conducción y valencia se refleja mediante la discontinuidad de la función $F_2(\eta)$ en $\eta = 0$.

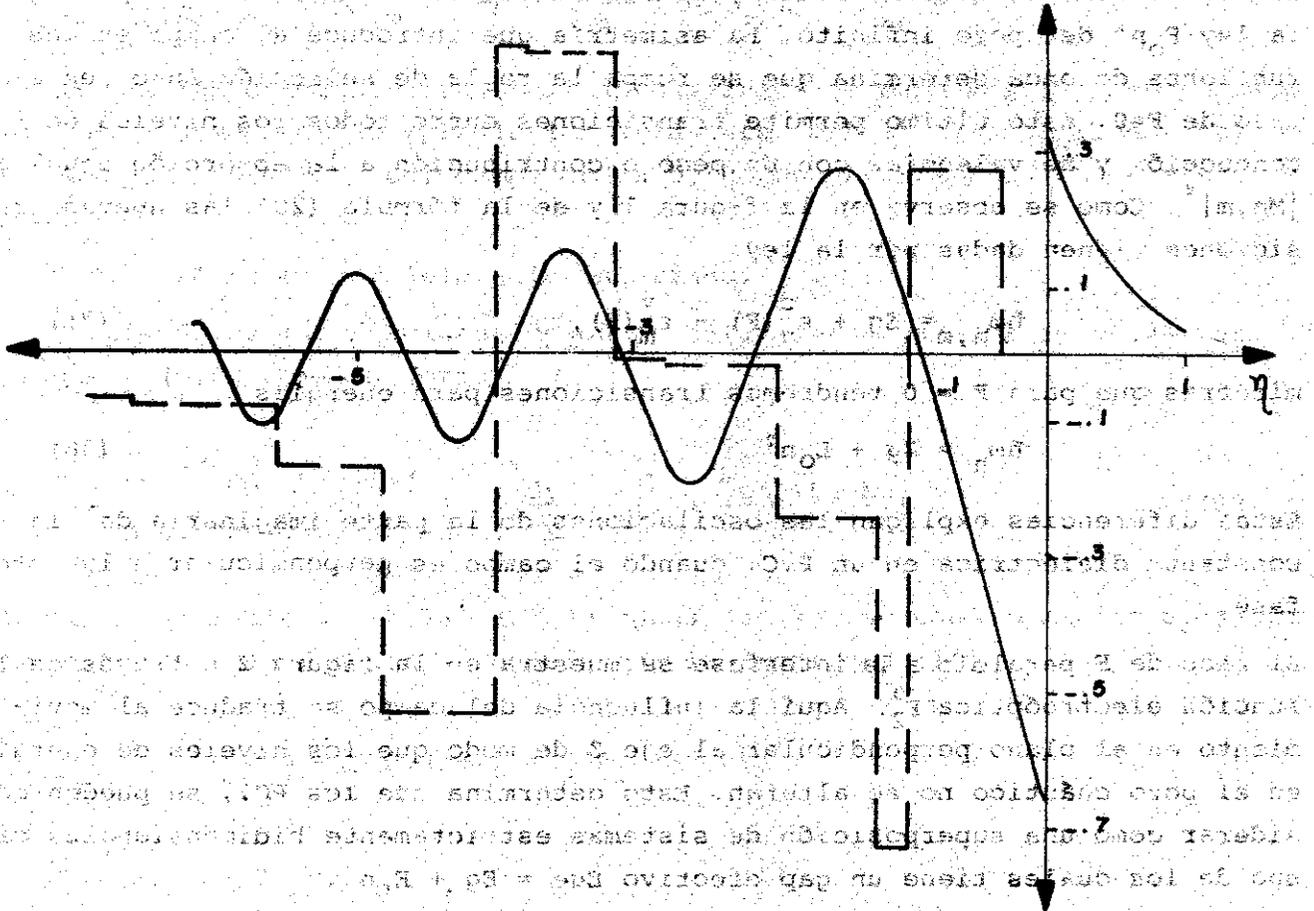


Figura 1. Función electroóptica F_2 representando el cambio en ϵ_2 producto del campo eléctrico perpendicular a la interfase en un pozo cuántico. Para el cálculo se tomó la relación de $E_0/\hbar\omega = 0.3$. En línea continua se ilustra la función electroóptica (38) cuando se considera el sistema estrictamente bidimensional.

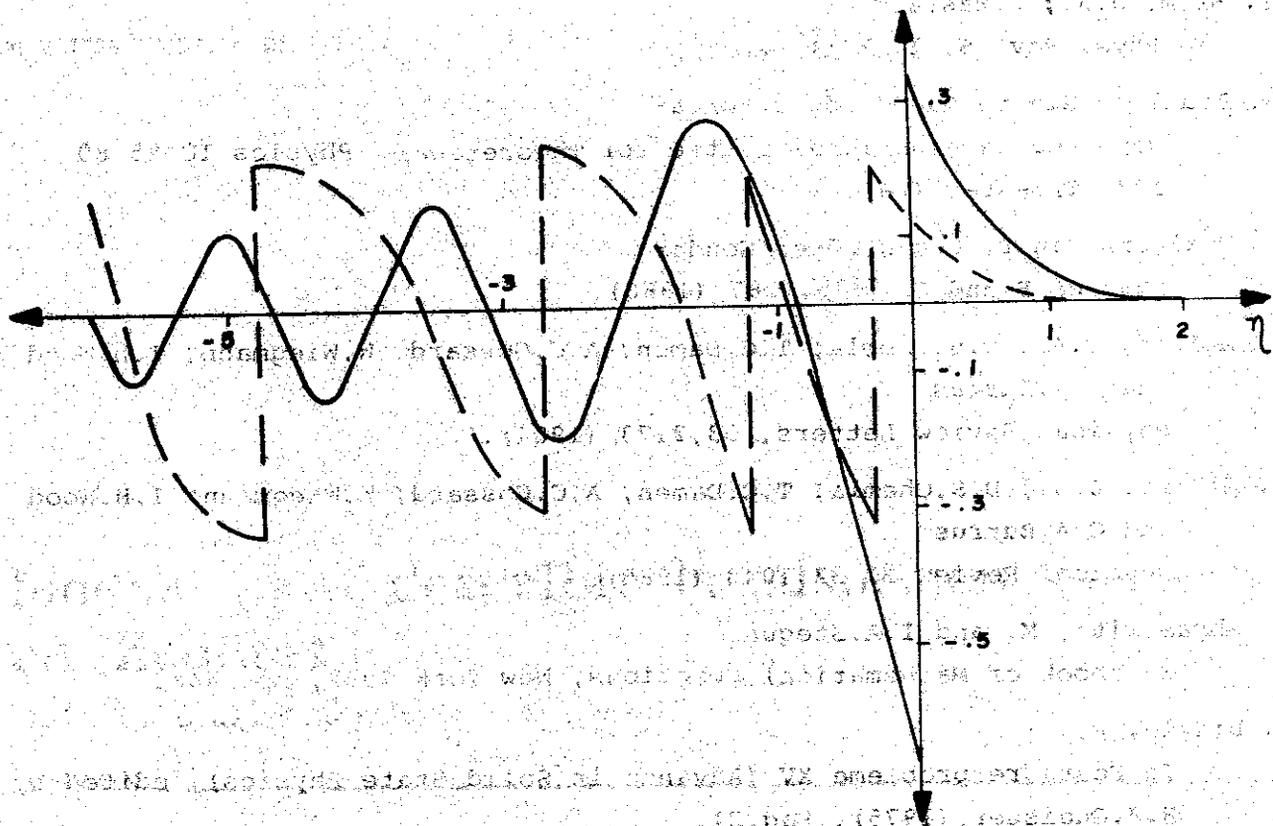


Figura 2. Función electroóptica F_2^4 representando el cambio en ϵ_2 producto del campo eléctrico paralelo a la interfase en un pozo cuántico. Para el cálculo se tomó la relación $E_0/\hbar\theta=0.3$. En línea continua se ilustra la función electroóptica (38) cuando se considera el sistema estrictamente bidimensional.

BIBLIOGRAFÍA

1. Alibert, C.; S.Gaillard; J.A.Brum; G.Bastard; P.Frijlink and M.Erman
Solid State Commun. 53,457 (1984).
2. Erman, M.; J.B.Theeten; P.Frijlink; S.Gaillard; Fan Jia Hia and
C.Alibert
J. Appl. Phys. 56, 3241 (1984).
3. Méndez, E.E.; E.Bastard; L.L.Chang; L.Esaki; H.Morkoc and R.Fisher
Phys. Rev. B 26,7101 (1982).
4. Miller, R.C. and A.C.Gossard
Appl. Phys. Lett, 43,864 (1983).
5. Wood, T.H., C.A.Burrus; D.A.B.Miller; D.S.Chemla; T.C.Damen; A.C.Gossard
and W.Wiegmann
Appl. Phys. Lett. 44,16 (1984).
6. Bastard, G.; E.E.Méndez; L.L.Chang and L.Esaki
Phys. Rev. B 28,3241 (1983).

7. Brum, J.A.; G.Bastard
Phys. Rev. B.31, 3893, (1985).
8. Trallero Giner, C.; J.López Gondar
Reporte: International Centre for Theoretical Physics IC/85/80
1985 Trieste, Italia.
9. Trallero Giner, C.; J.López Gondar
Physica B and C. 1388, 287 (1986).
10. Miller, D.A.; D.S.Chemla; T.C.Damen; A.C.Gossard; W.Wiegmann; T.H.Wood
and C.A.Burrus
Physical Review Letters, 53,2173 (1984).
11. Miller, D.A.; D.S.Chemla; T.C.Damen; A.C.Gossard; W.Wiegmann; T.H.Wood
and C.A.Burrus
Physical Review B, 32,1043 (1985).
12. Abramowitz, M. and I.A.Stegun
Handbook of Mathematical Functions, New York 1972, pp. 446.
13. Dingle, R.
In Festkorerprobleme XV (Advance in Solid State Physics), edited by
H.J.Gueisser (1975), Pag.21.
14. Aspnes, D.E.
Phys, Rev. 147,554 (1966)
15. Cardona, M.
Solid State Physics Suplemento 11 en "Modulation Spectroscopy"
editado por F.Seitz Academic Pres, New York, 1969.

Recibido: 17 de marzo de 1986.