

Структуры с квантовыми точками II типа GaAsBi в GaSb для лазеров среднего и дальнего ИК диапазонов*

Чжунюэ Чжан, Лияо Чжан, Минсюань Чжан, Шуан Яо, Пэн Юй, Сяодань Ли

Предложена структура с квантовыми точками (КТ) II типа GaAsBi в GaSb для лазеров среднего и дальнего ИК диапазонов. Для моделирования распределения деформаций и зонной структуры предложенных гетероструктур с различным содержанием Bi и размерами квантовых точек используется метод конечных элементов. Компонента ϵ_{xx} тензора деформаций уменьшается с ростом содержания Bi и высоты КТ и увеличивается с ростом ее диаметра, а компонента ϵ_{zz} изменяется обратным образом. Рекомбинация носителей заряда происходит между электронами КТ GaAsBi и дырками GaSb. Энергия основного состояния электронов КТ GaAsBi уменьшается, а длина волны излучения растет с увеличением содержания Bi и размеров КТ. При определенных содержании Bi и размерах КТ длина волны излучения может соответствовать среднему и дальнему ИК диапазонам. Предложенная структура открывает реальную возможность изготовления лазеров среднего и дальнего ИК диапазонов.

Ключевые слова: квантовая точка GaAsBi, структура II типа, инфракрасные лазеры.

1. Введение

Материал GaAsBi относится к разбавленным бисмидам и получается в результате включения небольшого количества атомов Bi в GaAs. Впервые GaAsBi удалось получить посредством осаждения металлоорганических соединений из газообразной фазы в 1998 г. [1] и молекулярно-пучковой эпитаксии в 2003 г. [2]. С момента своего успешного синтеза GaAsBi привлекает внимание замечательными свойствами. С каждым процентом добавленного Bi ширина запрещенной зоны GaAsBi уменьшается на 60–90 мэВ [2–4]. Одновременно с этим по мере увеличения содержания Bi растет энергия спин-орбитального расщепления GaAsBi [5]. При содержании Bi свыше 10% спин-орбитальное расщепление становится больше ширины запрещенной зоны [6], что значительно подавляет оже-рекомбинацию. Более того, ожидается, что ширина запрещенной зоны GaAsBi нечувствительна к температуре, поскольку GaAsBi состоит из полупроводникового и полуметаллического компонентов [7]. Перечисленные свойства делают GaAsBi потенциальным кандидатом на применение в оптоэлектронных устройствах, работающих в ИК диапазоне [8]. В последние годы GaAsBi послужил основой нескольких приборов. В 2010 г. был реализован лазер на GaAsBi с оптической накачкой [9], а в 2013 г. – с накачкой электрическим током [10]. Наибольшая длина волны, достигнутая в лазере на GaAsBi, составляет 1.407 мкм [11]

и относится к ближнему ИК диапазону. Дальнейшее повышение содержания Bi может ещё больше увеличить длину волны излучения – вплоть до среднего и дальнего ИК диапазонов. Однако почти для всех разбавленных бисмидов сложно обеспечить высокое содержание Bi [12–16], поскольку это требует низкотемпературного выращивания материала [17] и ухудшает его оптические свойства. Наибольшее достигнутое содержание Bi в тонкой пленке GaAsBi составляет 22% [17], тогда как в известных лазерах на GaAsBi в качестве активной среды используются тонкие пленки или квантовые ямы, в которых содержание Bi изменяется от 2.5% до 6%. При изготовлении лазеров на основе GaAsBi [9–11, 18–22] предпочтительнее умеренное содержание Bi. В настоящее время наиболее распространенными лазерами среднего (3–5 мкм) и дальнего (8–14 мкм) ИК диапазонов являются квантово-каскадные лазеры и каскадные лазеры на межзонных переходах на основе антимоноидов и/или арсенидов [23–25]. Обе эти структуры сложны [26] и требуют тщательного контроля при выращивании.

В настоящей работе предложена структура с КТ II типа GaAsBi в GaSb. Распределение деформаций и зонная структура рассчитывались методом конечных элементов. Управляя содержанием Bi и размером КТ, можно получить длину волны излучения от среднего до дальнего ИК диапазона. При этом требуется низкая концентрация Bi, что снимает проблемы введения большого количества Bi и сопутствующего ухудшения оптических свойств. В то же время в результате квантоворазмерного эффекта в КТ повышается эффективность испускания. Предложенная структура является несложной, легко реализуемой и упрощает изготовление лазеров, работающих в среднем и дальнем ИК диапазонах.

2. Методы

На рис.1,а представлена трехмерная схема предлагаемой структуры КТ GaAsBi/GaSb. Толщины верхнего и

* Перевод с англ. В.Л.Дербова.

Zhongyue Zhang, Liyao Zhang, Mingxuan Zhang, Shuang Yao, Peng Yu, Xiaodan Li. Department of Physics, University of Shanghai for Science and Technology, 200093 Shanghai, China; e-mail: lyzhang@usst.edu.cn

Поступила в редакцию 21 сентября 2020 г., после доработки – 23 ноября 2020 г.

нижнего слоев GaSb составляют по 50 нм. Предполагается, что квантовая точка GaAsBi имеет форму купола. Содержание Bi M , диаметр D и высота H КТ варьировались от нуля до 11%, от 10 до 40 нм и от 1 до 10 нм соответственно. Распределение деформаций рассчитывалось с использованием теории упругости сплошной среды [27]. Тензор напряжений σ и тензор деформаций ε имеют следующий вид:

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix}, \quad \varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix}. \quad (1)$$

По закону Гука связь между σ и ε такова:

$$\sigma_y = \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 C_{i,j,k,l} \varepsilon_{kl}, \quad (2)$$

где C – тензор модулей упругости. С учетом симметричности тензоров σ и ε формулу (2) можно записать в виде

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zz} \end{bmatrix}. \quad (3)$$

Вследствие симметрии структуры цинковой обманки выражение для C можно упростить:

$$C = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix}. \quad (4)$$

После расчета распределения деформаций рассчитывалась зонная структура на основе теории деформационного потенциала [13]. Расположение зон и основные состояния электронов и дырок получались из решения уравнения Шрёдингера:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{m^*} \nabla^2 + V_0 + V_s \right) \varphi(r) = E \varphi(r), \quad (5)$$

где m^* – эффективная масса; V_0 – смещение зон между GaAsBi и GaSb; V_s – потенциал, индуцированный деформацией. Для электронов, тяжелых дырок и легких дырок потенциалы, индуцированные деформацией, имеют вид:

$$V_e = a_c(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \quad (6)$$

$$V_{hh} = -P - Q, \quad (7)$$

$$V_{lh} = -P + [Q - \Delta + (\Delta^2 + 2Q\Delta + 9Q^2)^{1/2}]/2, \quad (8)$$

где

$$P = -a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}); \quad (9)$$

$$Q = -b(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})/2; \quad (10)$$

a_c и a_v – потенциалы гидростатической деформации для зоны проводимости и валентной зоны; b – потенциал сдвиговой деформации; Δ – энергия спин-орбитального расщепления. И использованные в настоящей работе значения параметров приведены в табл.1. Постоянные решетки для GaAs, GaBi и GaSb равны 5.65, 6.32 и 6.10 Å соответственно [28, 29]. Постоянные решетки и коэффициенты упругости C_{11} , C_{12} и C_{44} для GaAsBi получены с помощью линейной интерполяции таковых для GaAs и GaBi. Из-за недостатка данных деформационные потенциалы a_c и a_v для GaAsBi брались такими же, как у GaAs, в предположении низкого содержания Bi. Значение b для GaAs $_{1-x}$ Bi $_x$ получалось по формуле $b(\text{GaAs}) - 0.163x$ [30], а значение Δ для GaAsBi – из квадратичной интерполяции данных для GaAs и GaBi с параметром кривизны -6 эВ [31].

Табл.1. Параметры, использованные в расчетах.

Параметры	GaAs [28]	GaBi	GaSb [28]
C_{11} (ГПа)	1221	81.6 [32]	884.2
C_{12} (ГПа)	566	28.1 [32]	402.6
C_{44} (ГПа)	600	59.7 [32]	432.2
a_c (эВ)	-7.17		-7.5
a_v (эВ)	-1.16		-0.8
b (эВ)	2.0		-2.0
Δ (эВ)	0.341	2.15[31]	0.76
m_e^*	0.063 m_0	0.0655 m_0 [33]	0.041 m_0
m_{hh}^*	0.51 m_0	1.23 m_0 [33]	0.4 m_0
m_{lh}^*	0.082 m_0	0.18 m_0 [33]	0.05 m_0

3. Результаты и их обсуждение

3.1. Анализ деформаций

На рис.1, β – d показано распределение деформаций в структуре КТ GaAsBi/GaSb при содержании Bi $M = 6\%$, диаметре $D = 20$ нм и высоте КТ $H = 4$ нм. Компонента деформации ε_{xx} в КТ положительна и однородна со средним значением 0.05, отражающим деформацию растяжения в плоскости структуры. Последнее объясняется тем, что постоянная решетки у GaSb больше, чем у GaAsBi. В GaSb значение ε_{xx} отрицательно и быстро растет до нуля с удалением от границы между GaSb и GaAsBi. Величина ε_{zz} в КТ отрицательна, её среднее значение составляет -0.03 , что означает деформацию сжатия в направлении z . Сдвиговые компоненты деформации ε_{xy} и ε_{xz} (рис. 1, g и d) асимметричны в плоскости xy и имеют средние значения $3.1E-6$ и $-6.6E-7$ соответственно.

Результаты дальнейшего исследования влияния размеров КТ и содержания Bi на деформации представлены на рис.2. Величины ε_{xx} и гидростатических деформаций ($\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}$) положительны, тогда как при изменении диаметра КТ D от 10 до 40 нм, высоты КТ H от 1 до 6 нм и содержания Bi M от нуля до 11% величина ε_{zz} отрицательна. Эти данные отражают наличие деформации растяжения в плоскости структуры и сжатия в поперечном направлении. На рис.2, a видно, что с ростом D ε_{xx} увеличивается, а ε_{zz} уменьшается, причем скорость их измене-

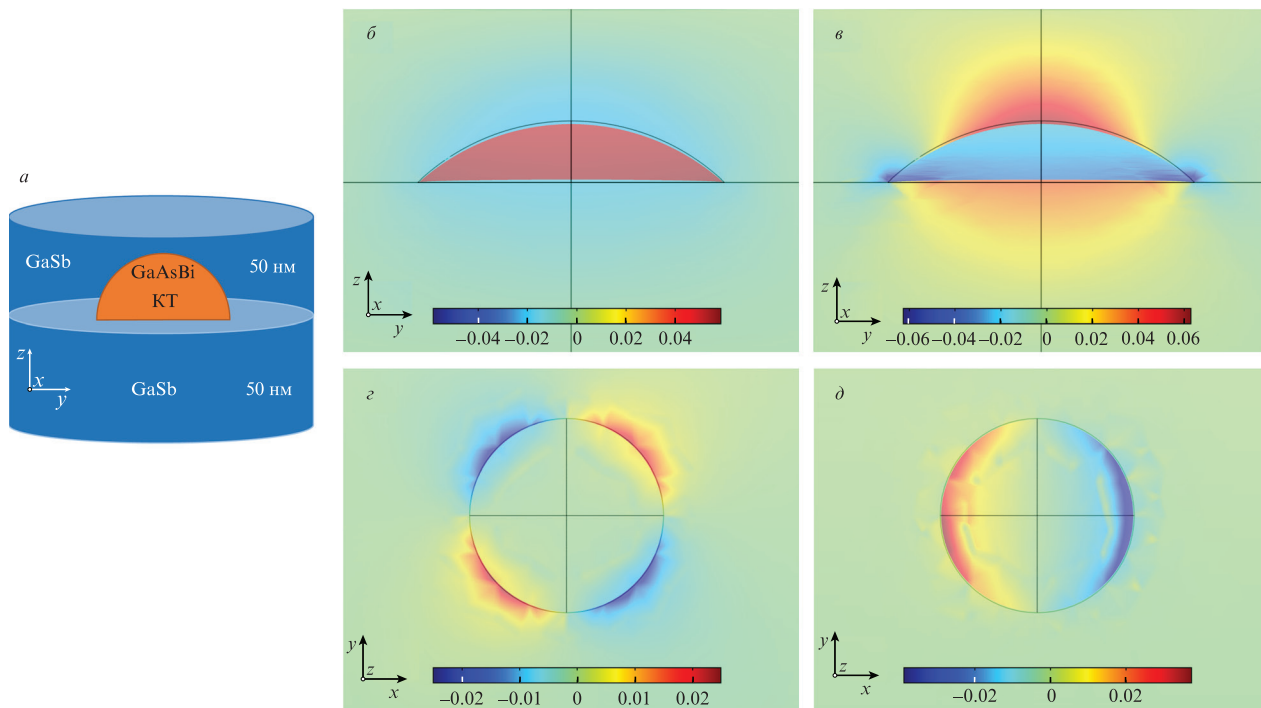


Рис.1. Схема структуры КТ GaAsBi/GaSb (а), а также распределения деформаций ε_{xx} (б) и ε_{zz} (в) в плоскости yz и ε_{xy} (г) и ε_{xz} (д) в плоскости xy этой структуры с $M = 6\%$, $D = 20$ нм и $H = 4$ нм. Цветные варианты рис. 1, 3 и 4, г представлены на сайте нашего журнала <http://www.quantum-electron.ru>.

ния выше при малых значениях диаметра. Из рис.2,б следует, что с ростом H ε_{xx} монотонно убывает с наклоном примерно -0.0035 нм^{-1} , а ε_{zz} монотонно возрастает с наклоном около 0.0077 нм^{-1} . На рис.2,в тенденция изменения деформаций ε_{xx} и ε_{zz} с ростом M такая же, как и при увеличении H : ε_{xx} линейно уменьшается с наклоном $-0.0008/M$, а ε_{zz} линейно возрастает с наклоном $0.0005/M$. На рис.2,г-е показано, как гидростатическая деформация изменяется с ростом размеров КТ и содержания Bi: она уменьшается с ростом D и M и увеличивается с ростом H . Относительное изменение гидростатических деформаций в зависимости от диаметра КТ намного меньше, чем в зависимости от высоты КТ и содержания Bi.

3.2. Зонная структура

На рис.3 показано расположение энергетических зон структуры КТ GaAsBi/GaSb с $M = 6\%$, $D = 20$ нм и $H = 4$ нм. Зоны расположены вдоль оси z , проходящей через центр КТ GaAsBi. В данной структуре формируется расположение зон II типа. Энергия максимума валентной зоны GaSb полагается равной нулю. Поскольку толщины эпитаксиальных слоев GaSb составляют 50 нм, зона легких дырок (ЗЛД) и зона тяжелых дырок (ЗТД) GaSb все еще вырождены в точке Γ . У квантовой точки GaAsBi зоны ЗЛД и ЗТД расщеплены, причем ЗЛД находится выше ЗТД. Рекомбинация носителей заряда происходит между электронами КТ GaAsBi и дырками GaSb. Так как энергия максимума валентной зоны GaSb принята равной нулю, энергия излучательной рекомбинации равна энергии основного состояния электронов ($e1$) КТ GaAsBi и составляет примерно 0.216 эВ, что соответствует длине волны излучения около 5.7 мкм. Эта структура может быть использована для создания лазеров среднего ИК диапазона.

Влияние содержания Bi и размеров КТ на зонную структуру и длину волны излучения λ проиллюстрировано на рис.4, из которого следует, что по мере роста диаметра и высоты КТ, а также содержания Bi энергия $e1$ уменьшается, а длина волны λ увеличивается. С ростом диаметра КТ от 10 до 40 нм при $M = 6\%$ и $H = 4$ нм (рис.4,а) λ увеличивается от 4 до 7.4 мкм, что соответствует среднему ИК диапазону длин волн. С ростом высоты КТ от 1 до 2.4 нм при $M = 6\%$ и $D = 20$ нм (рис.4,б) λ увеличивается с 1.7 до 3 мкм, что соответствует коротковолновой части ИК диапазона, при увеличении H с 3 до 3.6 нм λ возрастает с 3.8 до 5 мкм, что соответствует среднему ИК диапазону, и, наконец, с ростом H от 4.8 до 6 нм λ увеличивается с 8 до 13.4 мкм, что соответствует дальнему ИК диапазону. Увеличение содержания Bi от нуля до 4.5% при $D = 20$ нм и $H = 4$ нм (рис.4,в) приводит к росту длины волны λ с 3.5 до 5 мкм, а увеличение M от 8.6% до 11% вызывает рост λ с 8 до 12.3 мкм. На рис.4,г показано изменение λ в зависимости от диаметра и высоты КТ при фиксированном $M = 6\%$. Черные кривые указывают размеры КТ, при которых длины волн излучения составляют 3, 5, 8 и 14 мкм, т. е. размеры КТ GaAsBi/GaSb II типа, требуемые для создания лазеров среднего и дальнего ИК диапазонов. Нужно содержание Bi составляет всего лишь 6%, что легко достигается в GaAsBi при сохранении его хороших структурных и оптических свойств. Предложенная структура КТ GaAsBi/GaSb открывает простой путь к созданию лазеров среднего и дальнего ИК диапазонов за счет подбора содержания Bi и размеров КТ.

4. Заключение

В работе предложена структура с КТ GaAsBi II типа в GaSb для изготовления лазеров среднего и дальнего ИК

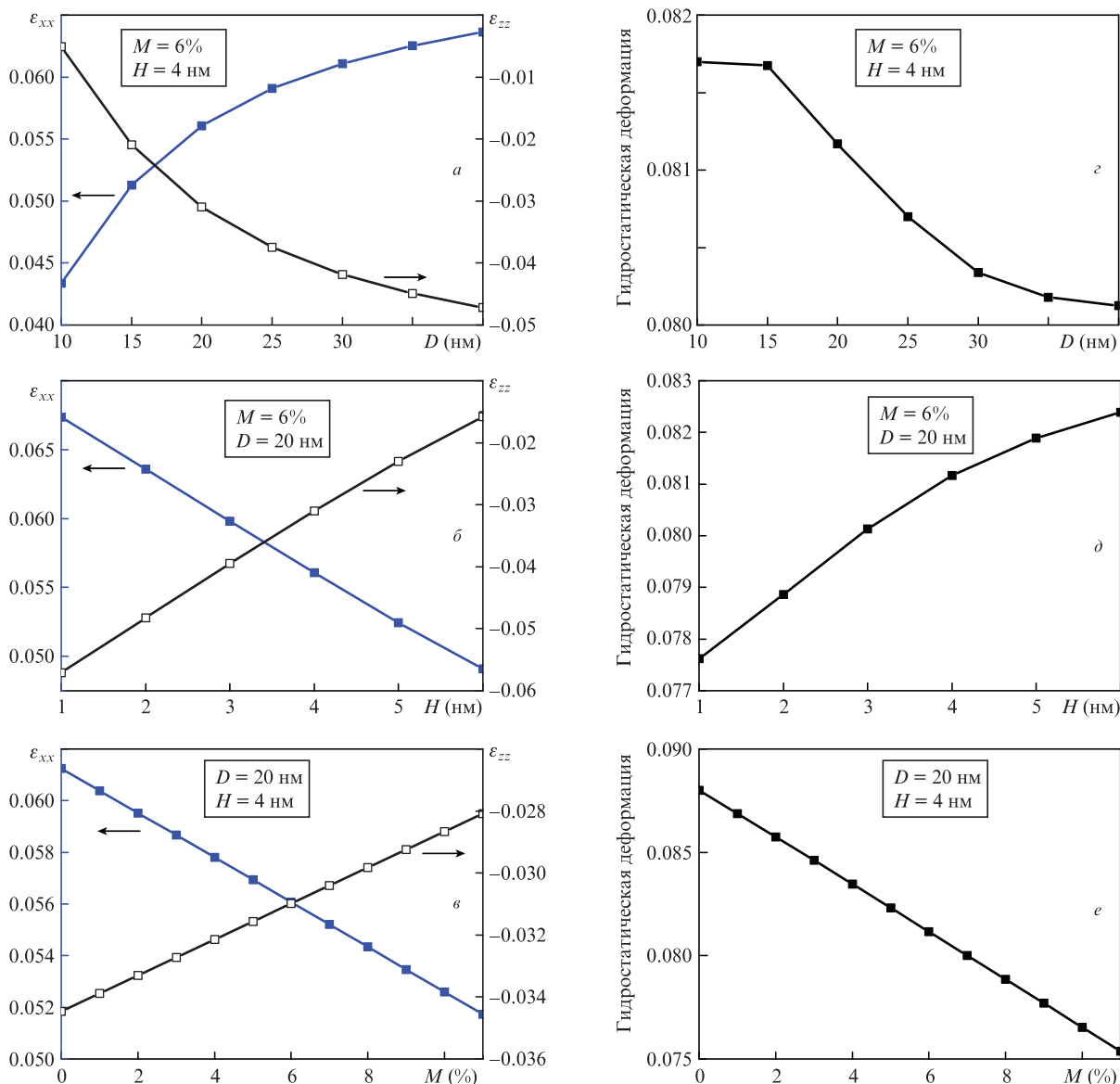


Рис.2. Зависимости компонент тензора деформации ϵ_{xx} и ϵ_{zz} в плоскости yz от диаметра (а), высоты (б) и содержания Вi (в), а также зависимости гидростатической деформации от диаметра (г), высоты (д) и содержания Вi (е) КТ GaAsBi.

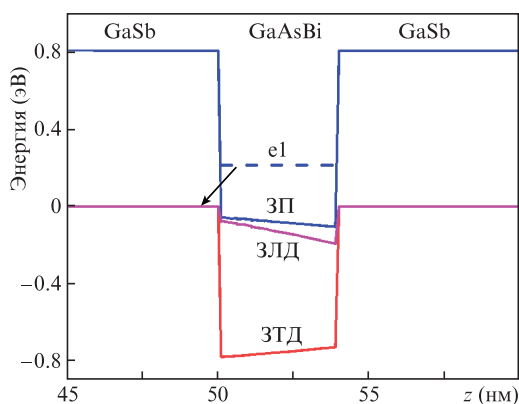


Рис.3. Расположение энергетических зон структуры КТ GaAsBi/GaSb в зависимости от координаты z вдоль оси, проходящей через центр КТ GaAsBi, при $M = 6\%$, $D = 20$ нм и $H = 4$ нм. Синяя, красная и фиолетовая линии отвечают зоне проводимости (ЗП), зоне тяжелых дырок (ЗТД) и зоне легких дырок (ЗЛД). Штриховой линией обозначено основное состояние электронов КТ GaAsBi, стрелкой – рекомбинация носителей заряда в структуре.

диапазонов. Распределения деформаций и зонная структура исследованы при различных содержаниях Вi и размерах КТ. Квантовые точки GaAsBi порождают деформации растяжения в плоскости структуры и сжатия в поперечном направлении. Компонента тензора деформации ϵ_{xx} уменьшается, а ϵ_{zz} растет с увеличением диаметра и высоты КТ, а также содержания Вi. Гидростатическая деформация уменьшается с ростом как диаметра КТ, так и содержания Вi, но увеличивается с ростом высоты КТ. Энергия основного состояния электронов КТ GaAsBi снижается, а длина волны излучения растет с увеличением диаметра, высоты КТ и содержания Вi. Длина волны излучения предложенной структуры может перекрывать средний и дальний ИК диапазоны при должном подборе размеров КТ и содержания Вi. Такая структура открывает простой путь к изготовлению лазеров среднего и дальнего ИК диапазонов.

Авторы благодарны за поддержку со стороны Национального естественно-научного фонда Китая (грант № 61904106) и Программы «Парус Шанхая» (грант № 19YF1435300).

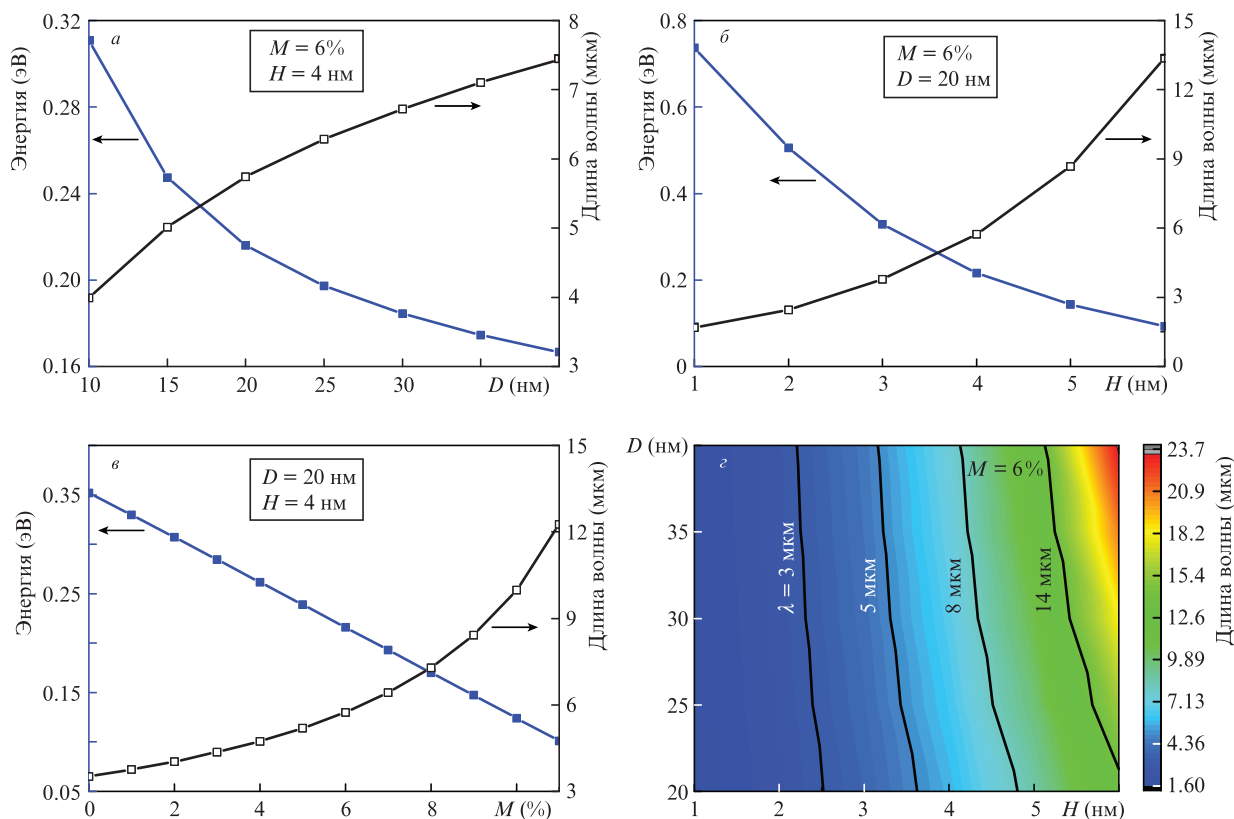


Рис.4. Зависимости энергии основного состояния электронов e_1 и длины волны излучения λ от диаметра КТ (а), высоты КТ (б) и содержания Bi (в), а также двумерная карта зависимости длины волны излучения от диаметра и высоты КТ (г). Черные кривые на рис.4,г соответствуют длинам волн излучения 3, 5, 8 и 14 мкм.

- Oe K., Okamoto H. *Jpn. J. Appl. Phys., Pt. 2-Lett.*, **37** (11A), L1283 (1998).
- Francoeur S., Seong M.J., Mascarenhas A., et al. *Appl. Phys. Lett.*, **82**, 3874 (2003).
- Tixier S., Adamcyk M., Tiedje T., et al. *Appl. Phys. Lett.*, **82**, 2245 (2003).
- Alberi K., Dubon O.D., Walukiewicz W., et al. *Appl. Phys. Lett.*, **91**, 051909 (2007).
- Sweeney S.J., Jin S.R. *J. Appl. Phys.*, **113**, 043110 (2013).
- Broderick C.A., Usman M., Sweeney S.J., et al. *Semicond. Sci. Technol.*, **27** (9), 094011 (2012).
- Moussa I., Fitouri H., Rebey A., et al. *Thin Solid Films*, **516** (23), 8372 (2008).
- Fitouri H., Chakir K., Chine Z., et al. *Mater. Lett.*, **152**, 298 (2015).
- Tominaga Y., Oe K., Yoshimoto M. *Appl. Phys. Express*, **3** (6), 062201 (2010).
- Ludewig P., Knaub N., Hossain N., et al. *Appl. Phys. Lett.*, **102**, 242115 (2013).
- Liu X., Wang L., Fang X., et al. *Photon. Res.*, **7**, 508 (2019).
- Baladés N., Sales D.L., Herrera M., et al. *Nanoscale Res. Lett.*, **13**, 125 (2018).
- Zhang L., Song Y., Gong Q. *Int. J. Mol. Sci.*, **20**, 6001 (2019).
- Pan W., Zhang L., Zhu L., et al. *Semicond. Sci. Technol.*, **32**, 1 (2016).
- Pan W., Zhang L., Zhu L., et al. *J. Appl. Phys.*, **120**, 094011 (2016).
- Pan W., Wang P., Wu X., et al. *J. Alloys Compd.*, **656**, 777 (2016).
- Lewis R.B., Masnadi-Shirazi M., Tiedje T. *Appl. Phys. Lett.*, **101** (8), 963 (2012).
- Zhou T., Liu X., Cui Y., et al. *AIP Adv.*, **8**, 075306 (2018).
- Fuyuki T., Yoshioka R., Yoshida K., et al. *Appl. Phys. Lett.*, **103**, 1 (2013).
- Butkutė R., Geizutis A., et al. *Electron. Lett.*, **50**, 1155 (2014).
- Fuyuki T., Yoshida K., Yoshioka R., et al. *Appl. Phys. Express*, **7**, 082101 (2014).
- Kim H., Guan Y., Babcock S.E., et al. *J. Appl. Phys.*, **123**, 113102 (2018).
- Christola P., Joullié A., Rodriguez J.B., et al. *Proc. SPIE*, **5582** (2004).
- Vurgafman I., Weih R., Kamp M., et al. *Phys. D: Appl. Phys.*, **48**, 123001 (2015).
- Borri S., Cumis M.S.D., Viciani S., et al. *Proc. SPIE*, **10939** (2020).
- Becker S., Gerlach G., Hildebrandt L., et al., in *Proc. Progress in Electromagnetic Research Symposium (PIERS)* (Shanghai, China, 8–11 August, 2016).
- Grundmann M., Stier O., Bimberg D. *Phys. Rev. B.*, **52** (16), 11969 (1995).
- Vurgafman I., Jeyer M., Ram-Mohan L. *J. Appl. Phys.*, **89**, 5815 (2001).
- Masnadi-Shirazi M., Lewis R.B., Bahrami-Yekta V., et al. *J. Appl. Phys.*, **116**, 223506 (2014).
- Batool Z., Hild K., Hosea T.J.C., et al. *J. Appl. Phys.*, **111** (11), 2245 (2012).
- Fluegel B., Francoeur S., Mascarenhas A., et al. *Phys. Rev. Lett.*, **97** (6), 067205 (2006).
- Ferhat M., Zaoui A. *Phys. Rev. Lett.*, **73** (11), 115107 (2006).
- Zayan A., Stevens M., Vandervelde T.E. *IEEE 43rd Photovoltaic Specialists Conference (PVSC)* (Portland, OR, 2016, p. 2839).