

Propiedades ópticas de magnetoexcitones en un pozo cuántico doble cerca de la superficie

B. Flores-Desirena

*Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Universidad Autónoma de Puebla,
Apdo. Post. 1152, Puebla, Pue. 72000, México*

F. Pérez-Rodríguez

*Instituto de Física, Universidad Autónoma de Puebla,
Apdo. Post. J-48, Puebla, Pue. 72570, México.*

(Recibido: 31 de diciembre de 2006; Aceptado: 6 de diciembre de 2006)

In this work, we present a theoretical study of the excitonic optical properties for a symmetric double quantum well either near the sample surface or in the bulk, considering that the heterostructure is subjected to a strong magnetic field. The study of the optical response is investigated within the framework of Stahl's real-space density-matrix approach, which takes into account the coupling between the coherent electron-hole interband amplitude and the incident electromagnetic wave. Our results for the optical absorption spectra of a symmetric double quantum well in the bulk agree with those calculated in the work[1], whereas the reflectivity spectra of the near-surface heterostructure show the well-known shift to the blue[2-4]. Concretely, we present the evolution of the reflectivity and absorption spectra as function of the well widths when the double quantum well is in the bulk and near-surface.

Keywords: Magnetoexciton; Double quantum well

En este trabajo presentamos un estudio teórico de las propiedades ópticas excitónicas de un pozo cuántico doble simétrico localizado ya sea cerca de la superficie o en el volumen, considerando que la heteroestructura está sometida a un campo magnético intenso. El estudio de la respuesta óptica se hace desde el formalismo de la aproximación de la matriz de densidad de Stahl, la cual toma en cuenta el acoplamiento entre la amplitud coherente interbanda electrón-hueco y la onda electromagnética incidente. Nuestros resultados para espectros de absorción óptica de pozo cuántico doble simétrico en el volumen coinciden con los de la referencia[1], mientras que los espectros de reflectividad de la heteroestructura cercana a la superficie muestran el ya conocido corrimiento hacia al azul[2-4]. Concretamente presentamos la evolución de los espectros de reflectividad y absorción en función del ancho del pozo cuántico cuando el pozo cuántico doble está en el volumen y cerca de la superficie.

Palabras clave: Magnetoexciton; Pozo cuántico doble

1. Introducción

Excitones en semiconductores nanoheteroestructurados bajo la acción de un campo magnético intenso (magnetoexcitones) han sido estudiados tanto experimental[2-4] como teóricamente [1,5-15]. Específicamente, magnetoexcitones en pozos cuánticos simples han sido observados a través de espectros ópticos de fotoluminiscencia[2-4], absorción[1,5,6] y reflectividad[7-9].

La relativa facilidad con la que puede abordarse la dinámica de un excitón bajo la acción de un campo magnético intenso, se debe a que la interacción coulombiana es fuertemente suprimida tanto por el campo magnético aplicado (en la dirección de crecimiento), como por el confinamiento de la heteroestructura. Esto último nos permite desarrollar la amplitud de onda interbanda y el campo eléctrico de la onda electromagnética en una base ortogonal. Construimos la base con las funciones de onda del electrón y el hueco que resultan del confinamiento de la nanoheteroestructura, así como de la base de Landau apropiada para el caso de un campo magnético intenso. Con este procedimiento hemos mostrado que las resonancias magnetoexcitónicas en los espectros de

fotoluminiscencia experimentales[3], están en buena concordancia con nuestros resultados teóricos de reflectividad y absorción. [10] En los trabajos experimentales[2-4] se estudia el efecto de la capa superficial (de espesor L_s) sobre los espectros de fotoluminiscencia magnetoexcitónica en pozos cuánticos simples. Se ha mostrado experimental [2-4] y teóricamente [8,10] que las resonancias sufren un corrimiento hacia el azul con el decrecimiento de la capa superficial. Dicho corrimiento es debido principalmente a la influencia del potencial imagen, el cual actúa cuando el excitón se acerca a la superficie de la heteroestructura. Adicionalmente hemos mostrado que para un pozo cuántico de *GaAs/InGaAs* con ancho de 5nm (considerado en[2-4]), la variación del grosor de la capa superficial puede alterar no sólo la posición de las resonancias sino también la forma de línea en la reflectividad. Para capas superficiales $L_s < 20$ nm las resonancias son máximos y alcanzan su máximo corrimiento hacia el rojo; cuando $L_s = 20$ nm. Para $L_s = 60$ nm las resonancias son mínimos y para $L_s = 120$ nm resultan nuevamente máximos, sin embargo, sus posiciones en energías son como para $L_s = 20$ nm [8].

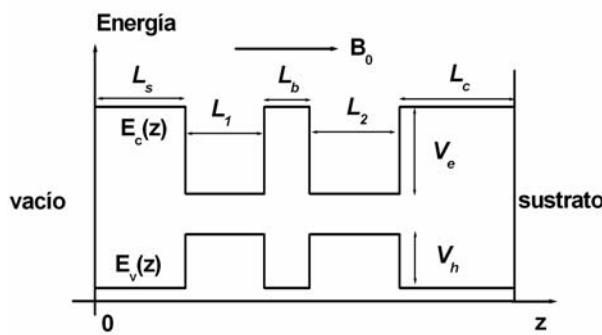
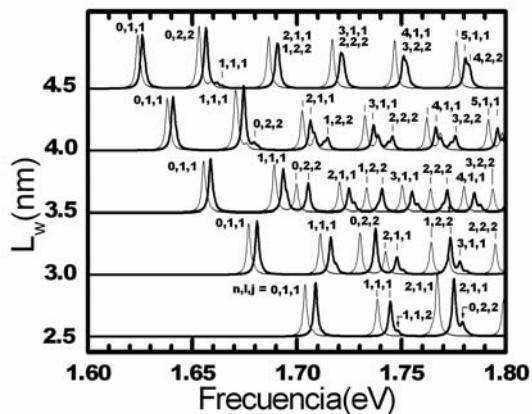


Figura 1. Geometría del sistema, se representa esquemáticamente en la dirección vertical el potencial de confinamiento debido a la heteroestructura, y en la dirección horizontal indicamos las longitudes características utilizadas.



degeneradas en el volumen. Ahí mostramos que la cercanía con la superficie es capaz de remover dicha degeneración, observándose en los espectros de absorción y reflectividad los niveles $n-1e1h$ $n-2e2h$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) claramente separados. Lo anterior se logró en un PCD de $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ y una capa superficial de 3nm. Un estudio más completo de las propiedades ópticas de PCDs simétricos y asimétricos en el volumen o cerca de la superficie se reporta en la referencia [19].

Presentamos aquí un estudio teórico de la respuesta óptica de magnetoexcitones en un PCD simétrico en el volumen y cerca de la superficie. El acoplamiento del magnetoexcitón en un PCD con la luz que incide sobre la heteroestructura se describe dentro del formalismo de la aproximación de la matriz de densidad de Stahl [16]. Concretamente presentamos la evolución de los espectros de absorción y reflectividad para PCDs en el volumen y cerca de la superficie en función del ancho de los pozos. Nuestros resultados para la absorción de PCDs en el volumen son comparados con los de la referencia [1]. Mientras que los espectros para el caso cercano a la superficie son presentados aquí por primera vez. La teoría utilizada fue también aplicada en nuestros trabajos [8,10,15,17,19].

2 Teoría

Consideramos un PCD simétrico localizado cerca de la superficie, como se muestra en la Fig. 1. Esencialmente, nuestro sistema se compone de dos pozos cuánticos de iguales anchos, es decir, $L_1 = L_2 = L_w$, separados por una capa interpozos de grosor L_b . Además, consideramos una capa superficial de ancho L_s y una capa colchón de tamaño L_c . Las regiones más allá de la heteroestructura son vacío ($z < 0$) y el sustrato local semiinfinito ($z > L = L_s + L_w + L_b + L_w + L_c$). Las propiedades ópticas de la heteroestructura semiconductora son descritas desde la aproximación de la matriz de densidad de Stahl, de acuerdo con la cual la amplitud de onda coherente interbanda $\bar{Y}(\vec{r}, \vec{R})$ está relacionada con el campo eléctrico $\bar{E}(\vec{R})$ de la onda electromagnética a través de la ecuación

$$[H_{vc} - \hbar(\omega + i\nu)]\bar{Y}(\vec{r}, \vec{R}) = M_{vc}(\vec{r})\bar{E}(\vec{R}), \quad (1)$$

donde $M_{vc}(\vec{r})$ es la matriz de transición dipolar interbanda, ω es la frecuencia de la onda electromagnética, ν la frecuencia de amortiguamiento fenomenológico, \vec{r} ($= \vec{r}_e - \vec{r}_h = (\vec{\rho}, z)$) y \vec{R} son los radios vectores excitónicos relativo y del centro de masa. H_{vc} es el hamiltoniano de dos bandas, el cual se puede escribir como

$$H_{vc} = E_g + H_{ez} + H_{hz} + H_{2D} + U, \quad (2)$$

donde E_g es el gap de energía en la región entre los pozos cuánticos, $H_{\lambda z}$ ($\lambda = e, h$) son los hamiltonianos para el electrón y el hueco en sus respectivas bandas

$$H_{\lambda z} = -\frac{\hbar^2}{2m_{\lambda z}} \frac{\partial^2}{\partial z_\lambda^2} + V_\lambda(z_\lambda), \quad \lambda = e, h \quad (3)$$

aquí $V_\lambda(z_\lambda)$ representa el potencial de confinamiento debido al PCD para el electrón ($\lambda = e$) y para el hueco ($\lambda = h$). El hamiltoniano bidimensional depende sólo de las coordenadas $\vec{\rho}_\lambda = (x_\lambda, y_\lambda)$ del electrón ($\lambda = e$) y el hueco ($\lambda = h$)

$$H_{2D} = \frac{1}{2m_{exy}} (-i\hbar \nabla_{\vec{\rho}_e} + e\vec{A}_e)^2 + \frac{1}{2m_{hxy}} (-i\hbar \nabla_{\vec{\rho}_h} - e\vec{A}_h)^2, \quad (4)$$

donde el vector potencial se relaciona con el campo magnético estático \vec{B}_0 (el cual es paralelo a la dirección de crecimiento z) por

$$\vec{A}_\lambda = \frac{1}{2} \vec{B}_0 \times \vec{\rho}_\lambda, \quad \lambda = e, h, \quad (5)$$

y U toma en cuenta la interacción coulombiana entre las cargas del excitón y la interacción coulombiana del excitón con la superficie a través del potencial imagen, es decir,

$$U = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_b} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} + \frac{\epsilon_b - 1}{\epsilon_b + 1} \\ \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z_e + z_h)^2}} - \frac{1}{4} \left(\frac{1}{z_e} + \frac{1}{z_h} \right) \end{array} \right\} \quad (6)$$

donde ϵ_b es la constante dieléctrica de bajas frecuencias.

La amplitud de onda coherente $\bar{Y}(\vec{r}, \vec{R})$ y el campo eléctrico $\bar{E}(\vec{R})$ obedecen también la ecuación de onda de Maxwell

$$\nabla \times \nabla \times \bar{E}(\vec{R}) - \epsilon_\infty \frac{\omega^2}{c^2} \bar{E}(\vec{R}) = \frac{\omega^2}{\epsilon_\infty c^2} \bar{P}(\vec{R}), \quad (7)$$

donde ϵ_∞ es la constante dieléctrica de altas frecuencias, c es la velocidad de la luz en el vacío. La polarización magnetoexcitónica de la Eq. (7) se relaciona con la amplitud de onda coherente por medio de la ecuación

$$\bar{P}(\vec{R}) = 2 \int M_{vc}(\vec{r}) \bar{Y}(\vec{r}, \vec{R}) d^3 r. \quad (8)$$

La matriz de densidad dipolar de transición interbanda $M_{vc}(\vec{r})$ que aparece en las ecuaciones (1) y (8) queda bien descrita con el modelo de capa [20,21]

$$M_{vc}(\vec{r}) = \frac{M_0}{2\pi\rho} \delta(\rho - \rho_c) \delta(z), \quad \rho_c \rightarrow 0 \quad (9)$$

Nuestro método para resolver el conjunto de ecuaciones (1)-(8) se basa en la expansión de la amplitud de onda coherente $\bar{Y}(\vec{r}, \vec{R})$ y el campo eléctrico $\bar{E}(\vec{R})$ en una base ortogonal, la cual construimos con productos de las eigenfunciones de los hamiltonianos $H_{\lambda z} (\lambda = e, h)$ (3) y H_{2D} (4). Las ecuaciones que resultan al combinar aquellas del sistema (1) y (7) presentan términos no diagonales debidos a la interacción coulombiana (6). En la solución del problema, las amplitudes de los campos eléctricos de la onda electromagnética reflejada y transmitida son determinadas de las condiciones de frontera de Maxwell sobre las interfaces $z=0$ y $z=L$. Las condiciones de frontera se complementan con la condición de anulación de la amplitud de onda coherente $\bar{Y}(\vec{r}, \vec{R})=0$ cuando el electrón o el hueco están en las interfaces $z=0$ o $z=L$. Finalmente, de nuestra solución numérica, la reflectividad (R), la transmitividad y la absorción se calculan para el PCD en el volumen o cerca de la superficie.

3 Resultados y conclusiones

Aplicamos nuestra teoría para calcular la reflectividad y la absorción a incidencia normal de un PCD de $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ en el volumen y cerca de la superficie, bajo un campo magnético de 10T. El gap de las bandas fue calculado con la fórmula empírica $E_g = 1.52 + 1.36x + 0.22x^2$ (eV) y distribuido con 60% de ΔE_g para la discontinuidad de la banda de conducción ΔE_c y un 40% para la discontinuidad de la banda de valencia ΔE_v [1]. La masa del electrón isotrópica considerada fue $m_e = 0.067m_0$ (m_0 es la masa del electrón libre), para el hueco pesado anisotrópico utilizamos $m_{hy} = 0.1m_0$, $m_{hz} = 0.45m_0$. Para las constantes dieléctricas estática y de altas frecuencias usamos $\epsilon_b = \epsilon_\infty = 12.5$. Para los parámetros físicos del PCD se utilizaron: $L_b = 2.5$ nm para la barrera interpozos, $L_c = 50$ nm para la capa colchón, $L_s = 50$ nm para simular al PCD en el volumen y $L_s = 3$ nm para la capa superficial cuando el PCD está cerca de la superficie. Consideramos además que el PCD es simétrico, es decir, $L_1 = L_2 = L_w$ y $L_w = 2.5, 3, 3.5, 4, 4.5$ nm. De acuerdo con los parámetros de masas y características físicas de los pozos, se tiene para el hueco en la banda de conducción $j_{max} = 3, 4, 4, 4, 5$ niveles para cada uno de los PCDs, respectivamente, mientras para el electrón en la banda de valencia se tiene el mismo nivel $l_{max} = 2$. En nuestro cálculo de los espectros de

reflectividad y absorción, para la expansión de la amplitud de onda coherente electrón-hueco utilizamos 4 niveles de Landau y los valores de l_{max} y j_{max} indicados.

En la Fig. 2 presentamos los espectros de absorción de los diferentes pozos cuánticos considerados. En líneas delgadas presentamos los espectros para PCDs en el volumen (para fines de cálculo usamos $L_s = 50$ nm), los cuales coinciden con los calculados en la referencia[1], mientras que los espectros para PCDs cerca de la superficie se calcularon con $L_s = 3$ nm (en línea gruesa). En forma general los espectros calculados para PCDs cerca de la superficie muestran una corriente hacia el azul de las resonancias magnetoexcitónicas, se observa también un mayor corrimiento de las resonancias (respecto de aquellas en el volumen) para mayores niveles de Landau. Particularmente en los espectros de PCDs con ancho de pozo $L_w = 2.5$ nm se observa que la separación entre los niveles de Landau es menor que la separación de subbandas electrón-hueco para el mismo nivel de Landau, es decir, $0-e1h1$ y $0-e2h2$; para pozos cuánticos más gruesos esta separación se va reduciendo tal que en el caso extremo, para $L_w = 4.5$ nm, la separación sub-banda es menor que la separación entre niveles de Landau. Por supuesto, la separación entre los niveles de Landau es siempre la misma, ya que ésta depende sólo de la intensidad del campo magnético. Por otro lado, observemos que una capa superficial delgada induce la manifestación de los niveles magnetoexcitónicos inter-pozo (espacialmente indirecto); en la Fig. 2 con $L_w = 4$ nm puede apreciarse una estructura adicional entre los picos intensos $2-e1h1$ y $1-e2h2$ con resonancias que corresponden a los niveles $2-e1h2$ y $1-e2h1$, es decir, a excitones con su electrón y hueco en pozos diferentes del PCD; niveles semejantes se manifiestan entre las resonancias $3-e1h1$, $2-e2h2$ y $4-e1h1$, $3-e2h2$.

En la Fig. 3 presentamos la reflectividad para PCDs en el volumen y cerca de la superficie. Se pueden hacer las mismas observaciones que para el espectro de absorción (Fig. 2) respecto a la posición de las resonancias, sin embargo, el espectro de la reflectividad para el PCD en el volumen ($L_s = 50$ nm) resulta estar rotado en comparación con el espectro de la reflectividad para el PCD cercano a la superficie ($L_s = 3$ nm), lo cual se debe al cambio de fase de la onda electromagnética dentro de la heteroestructura vía la capa superficial. Una manera simple de entender la rotación del espectro consiste en analizar el coeficiente de reflexión para un sistema de tres medios, el cual se expresa como

$$r = \frac{r_{12} + r_{12}r_{23}e^{2i\theta}}{1 + r_{12}r_{23}e^{2i\theta}}, \quad R = rr^*, \quad (10)$$

donde r_{12} es el coeficiente de reflexión entre el primer y el segundo medio, r_{23} es el coeficiente entre el segundo y el

tercer medio. Estas cantidades sólo dependen de los vectores de onda en los medios; y $\theta = q_z L$, donde q_z es la componente, perpendicular a la superficie, del vector de onda y L el grosor de la heteroestructura. Se observa de la expresión (10) que $R(L) = R(L + \pi / q_z) = R(L + \lambda / 2)$. Es decir, el período de la reflectividad está dado por media longitud de onda en la heteroestructura. El cálculo para la longitud de onda ($\lambda = 2\pi\hbar c / (\omega\sqrt{\epsilon_\infty})$) en el PCD, para una frecuencia de $\omega = 1.7$ eV nos da $\lambda = 206.7$ nm; por lo que media rotación del perfil de reflectividad (como el observado) correspondería aproximadamente a 50 nm que es justamente la variación de la capa superficial.

En conclusión, en este trabajo hemos determinado teóricamente las propiedades ópticas de magnetoexcitones en un PCD simétrico en el volumen y cerca de la superficie. Hemos utilizado para nuestro cálculo la aproximación de la matriz de densidad de Stahl. Específicamente, hemos presentado la evolución de la reflectividad y la absorción para un conjunto de PCDs de espesores L_w ($2.5 \text{ nm} < L_w < 4.5 \text{ nm}$) cuando $L_s = 3.50 \text{ nm}$. Los espectros de absorción con $L_s = 50 \text{ nm}$ resultaron ser como los reportados en la referencia[1], mientras que los correspondientes de reflectividad, así como todos los espectros ópticos para $L_s = 3 \text{ nm}$ se presentan por primera vez aquí. En estos últimos observamos el corrimiento de las resonancias hacia el azul así como el efecto de rotación en el perfil de reflectividad y la manifestación de niveles interpozos prohibidos en el volumen.

Agradecimientos

Trabajo apoyado parcialmente por CONACYT (proyecto SEP-2004-C01-46425) y VIEP-BUAP (proyecto 37/EXC/06-G).

Referencias

- [1] F. Vera and Z. Barticevic, J. Appl. Phys. **83**, 7720 (1998).
- [2] L. V. Kulik, V. D. Kulakovskii, M. Bayer and A. Forchel, N. A. Gippius, and S. G. Tikhodeev, Phys. Rev. B **54**, R2335 (1996).
- [3] A. L. Yablonskii, A. B. Dzyubenko, S. G. Tikhodeev, L. V. Kulik, and V. D. Kulakovskii, JETP Lett. **64**, 51 (1996).
- [4] N. A. Gippius, A. L. Yablonskii, A. B. Dzyubenko, S. G. Tikhodeev, I. V. Kulik, V. D. Kulakovskii, A. Forchel, J. Appl. Phys. **83**, 5410 (1998).
- [5] Francisco Vera, J. Phys. Condens. **12**, 10011 (2000).
- [6] A. Getter and I. E. Perakis, Phys. Rev. B, **60** 16027 (1999).
- [7] G. Martínez, R. Aguilar, P. H. Hernández and G. H. Coccoletzi, Phys. Rev. B, **62**, 6916 (2000).
- [8] B. Flores-Desirena and F. Pérez-Rodríguez, Appl. Surf. Sci. **212-213**, 127 (2003).
- [9] J. Shao, A. Dormen, R. Winterhoff and F. Scholz, J. Appl. Phys. **91**, 2553 (2002).
- [10] B. Flores-Desirena, tesis doctoral, Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, México, 2003.
- [11] J. Cen and K. K. Bajaj, Phys. Rev. B, **46**, 15280 (1992).
- [12] T. Kamizato and M. Matsuura, Phys. Rev. B, **43**, 4084 (1991).
- [13] M. M. Dignam and J. E. Sipe, Phys. Rev. B, **40**, 8378 (1989).
- [14] A. B. Dzyubenko and A. L. Yablonskii, Phys. Rev. B, **53**, 16355 (1996).
- [15] B. Flores-Desirena and F. Pérez-Rodríguez, phys. stat. sol. (c) **1**, S38 (2004).
- [16] A. Stahl and I. Balslev, Electrodynamics of the Semiconductor Band Edge, (Springer-Verlag, Berlin, 1987).
- [17] B. Flores-Desirena, enviado a la Revista Mexicana de Física.
- [18] V. V. Krivolapchuk, E. S. Moskalenko, A. L. Zhmodikov, T. S. Cheng and C. T. Foxon, Phys. Solid State **41**, 291 (1999).
- [19] B. Flores-Desirena and F. P. Pérez-Rodríguez, J. Appl. Phys. **102**, 063530 (2007).
- [20] G. Czajkowski and A. Tredicucci, Il Nuovo Cimento **14**, 1203 (1992).
- [21] D. Merbach, E. Schöll, W. Ebeling, P. Michler and J. Gutowski, Phys. Rev. **58**, 10709 (1998).
- [22] G. Czajkowski, M. Dressler and F. Bassani, Phys. Rev. B **55**, 5243 (1997).