

Интерфейсная оптическая анизотропия в гетероструктуре с различными катионами и анионами

© Е.Л. Ивченко, А.А. Торопов, П. Вуазен*

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия

* l'Ecole Normale Supérieure, 24 Rue Lhomond, 75005 Paris, France

(Поступила в Редакцию 21 апреля 1998 г.)

Построена теория оптической анизотропии и размерноквантованного эффекта Поккельса в структурах с квантовыми ямами $SA/C'A'(001)$ с различным катионно-анионным составом, т.е. при $C \neq C'$ и $A \neq A'$. Теория основана на обобщенном методе эффективной массы, в котором в граничных условиях для плавных огибающих учтено смешивание состояний тяжелых и легких дырок при нормальном падении дырки на интерфейс. Показано, что анизотропия поглощения при междзонных переходах возникает при различных коэффициентах смешивания t_{l-h} в граничных условиях для правого ($A-C'$) и левого ($A'-C$) интерфейсов. Проанализирован интерфейсый вклад в анизотропию, наведенную внешним электрическим полем, при совпадающих и несовпадающих разрывах зон на интерфейсах. Для оценки различия между коэффициентами $t_{l-h}(A-C')$ и $t_{l-h}(A'-C)$ использована микроскопическая модель сильной связи sp^3s^* .

Размерное квантование носителей тока в структурах с квантовыми ямами и перераспределение электронной плотности между соседними слоями в сверхрешетках — наиболее известные проявления разрыва зон на гетерограницах в наноструктурах. Наличие интерфейсов, понижающая трансляционную и точечную симметрию системы, может приводить не только к смешиванию электронных состояний с волновыми векторами $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ и $\tilde{\mathbf{k}} = (k_x, k_y, -k_z)$ из одной подзоны (z — ось роста структуры), но также и к междолинному или междозонному смешиванию [1,2]. В данной работе теоретически исследуется латеральная оптическая анизотропия структур с квантовыми ямами $SA/C'A'(001)$, обусловленная смешиванием на интерфейсах состояний тяжелых и легких дырок.

Рис. 1 иллюстрирует расположение атомов вблизи гетерограницы в структуре $SA/C'A(001)$ с общим анионом, такой, например, как GaAs/AlAs. Интерфейс представляет собой плоскость (001) с анионами А, для которых ближайшими соседями по разные стороны от плоскости являются катионы С и С'. Идеальный одиночный гетеропереход имеет точечную симметрию C_{2v} , включающую ось второго порядка $C_2 \parallel [001]$ и две плоскости отражения (110) и (110). Интерфейсы $C'-A-C$ (рис. 1, a) и $C-A-C'$ (рис. 1, b) переходят друг в друга при зеркальном повороте на 90° вокруг главной оси $z \parallel [001]$. Поэтому структура $SA/C'A(001)$ с квантовой ямой характеризуется достаточно высокой симметрией D_{2d} , при которой оптическая анизотропия в плоскости интерфейсов (x, y) отсутствует. В гетеропаре $SA/C'A'$ с различным катионно-анионным составом, например InAs/GaSb, (In,Ga)As/InP или ZnSe/BeTe, гетерограница $SA-na-C'A'$ состоит из двух плоскостей, содержащих атомы А и С' для границы типа $C-A-C'-A'$ (рис. 2) или атомы С и А' для границы типа $A-C-A'-C'$. При выращивании материала $C'A'$ на СА имеется также две возможности: $C'-A'-C-A$ и $A'-C'-A-C$ (подложка

расположена справа). Таким образом, при $C \neq C'$, $A \neq A'$ существует четыре варианта квантовой ямы (см., например, [3–5]). Обычно при выращивании структуры в отсутствие специального контроля предпочтение имеет

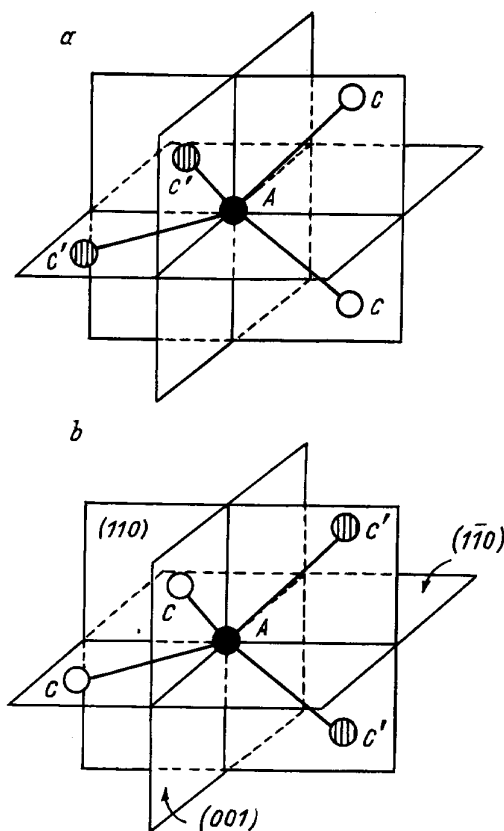


Рис. 1. Расположение атомов в окрестности интерфейса в гетероструктуре $SA/C'A(001)$ с общим анионом, например GaAs/AlAs. Левый интерфейс $C'-A-C$ (a) переходит в правый интерфейс $C-A-C'$ (b) при операции зеркального поворота вокруг оси $z \parallel [001]$.

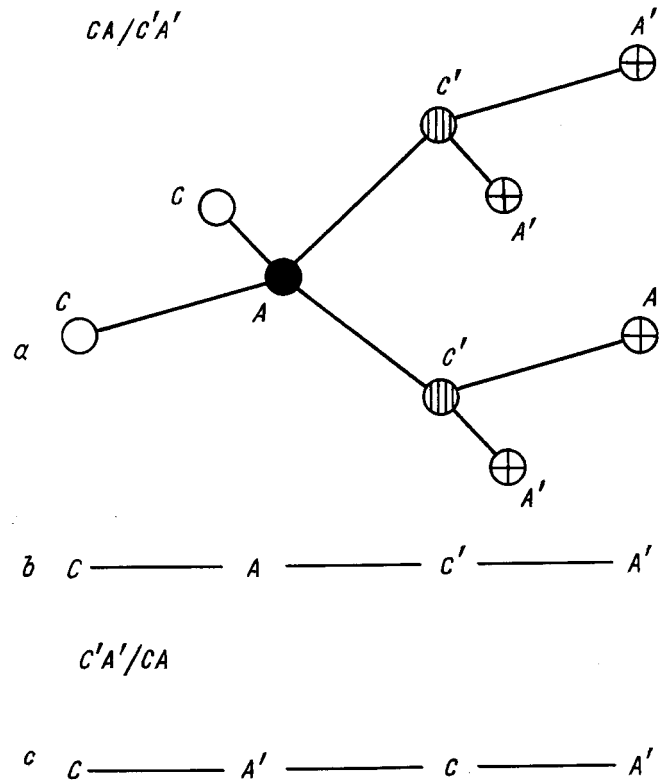


Рис. 2. Схематическое изображение расположения атомов в окрестности интерфейса в гетероструктуре CA/C'A'(001) с различными катионами и анионами. *a*) — интерфейс A-C', *b*) — тот же интерфейс, но указаны только атомарные плоскости; *c*) — последовательность атомарных плоскостей в окрестности интерфейса A'-C.

вариант с интерфейсами C'-A'-C-A и C-A-C'-A', в которых на плоскость, заполненную катионами одного материала, наращивается плоскость с анионами другого материала. Эти два интерфейса с различными внутренними связями A'-C и A-C' не переходят друг в друга ни при каком ортогональном преобразовании, структура с квантовой ямой сохраняет симметрию C_{2v} и ее оптические свойства в поляризациях $\mathbf{e} \parallel [110]$ и $\mathbf{e} \parallel [1\bar{1}0]$ должны различаться. Гигантская оптическая анизотропия в гетероструктурах без общих катионов и анионов была предсказана Кребсом и Вуазеном [6] и обнаружена в квантовых ямах GaInAs/InP [7,8]. В [6] был развит полукачественный подход (модель H_{bf}) для описания этой анизотропии, в [8] представлены результаты численного расчета, выполненного в микроскопической модели сильной связи. Развита в настоящей работе теория основана на обобщенном методе плавных огибающих, использованном ранее в [2] при изучении гетероструктур с общим анионом.

1. Оптическая анизотропия в методе плавных огибающих

Мы рассчитаем латеральную оптическую анизотропию структуры с квантовой ямой CA/C'A' на границе края поглощения, т.е. при междузонных переходах $hh1 \rightarrow e1$ с нулевым двумерным волновым вектором

электрона ($k_x = k_y = 0$, Γ -точка). В методе плавных огибающих электронный и дырочный эффективные гамильтонианы внутри ямы или в барьере имеют такой же вид как в соответствующих объемных материалах и, в частности, обладают кубической симметрией T_d , а низкая симметрия интерфейса учитывается включением дополнительных слагаемых в граничные условия для огибающей волновой функции. Пренебрегая релятивистски малыми поправками, мы используем для электрона в зоне проводимости общепринятые граничные условия — непрерывность огибающей и ее нормальной производной, деленной на эффективную массу. В этом случае волновая функция электрона на дне подзоны e1 имеет стандартный вид

$$\psi_{\pm 1/2}^{(e1)} = K(z) |\Gamma_6, \pm 1/2\rangle, \quad (1)$$

где $|\Gamma_6, \pm 1/2\rangle$ — блоховские функции $\uparrow S$ и $\downarrow S$, S — координатная функция представления Γ_1 группы T_d .

Для четырех огибающих φ_m ($m = \pm 3/2, \pm 1/2$) волновой функции дырки мы используем граничные условия, предложенные впервые в [2],

$$\begin{aligned} \varphi_m &= \varphi'_m, \\ \nabla_m \varphi_m &= \nabla'_m \varphi'_m + \frac{2}{\sqrt{3}} t_{l-h} \sum_n \{J_x J_y\}_{mn} \varphi'_n, \end{aligned} \quad (2)$$

в которых учитывается смешивание между состояниями тяжелых и легких дырок на интерфейсе (001), допус-

каемое симметрией интерфейса даже при нормальном падении дырки, т.е. при $k_x = k_y = 0$. При записи граничных условий мы использовали обозначения: $m, n = \pm 3/2, \pm 1/2$,

$$\nabla_{\pm 3/2} = a_0 \frac{m_0}{m_{hh}} \frac{d}{dz}, \quad \nabla_{\pm 1/2} = a_0 \frac{m_0}{m_{lh}} \frac{d}{dz},$$

a_0 — постоянная решетки, m_0 — масса свободного электрона, m_{hh}, m_{lh} — эффективные массы тяжелых и легких дырок, различные в материалах СА и С'А', здесь и в дальнейшем величины, характеризующие материал С'А', отмечены штрихом, J_α — матрицы углового момента для $J = 3/2$ в базисе Γ_8 , $\{J_x J_y\} = (J_x J_y + J_y J_x)/2$, t_{l-h} — безразмерный параметр смешивания "тяжелая-легкая дырка". При $t_{l-h} \neq 0$ пара крамеровско-сопряженных состояний на дне дырочной подзоны hh1 содержит примесь состояний с $m = \pm 1/2$

$$\psi_{\pm 3/2}^{(hh1)} = F(z) |\Gamma_8, \pm 3/2\rangle \pm iG(z) |\Gamma_8, \mp 1/2\rangle, \quad (3)$$

$|\Gamma_8, m\rangle$ — блоховские функции. Заметим, что второе из граничных условий (2) для функции $G(z)$ имеет вид

$$\frac{1}{m_{hh}} \frac{dG}{dz} = \frac{1}{m'_{hh}} \frac{dG'}{dz} + \frac{t_{l-h}}{a_0 m_0} F'. \quad (4)$$

Внутри квантовой ямы плавные вещественные огибающие $F(z)$ и $G(z)$ имеют вид

$$\begin{aligned} F(z) &= A \cos k_h z + B \sin k_h z, \\ G(z) &= C \cos k_l z + D \sin k_l z, \end{aligned} \quad (5)$$

в барьерных слоях $z > a/2$ и $z < -a/2$ они экспоненциально затухают

$$\begin{aligned} F(z) &= F(\pm a/2) \exp[-\varkappa_h (|z| - a/2)], \\ G(z) &= G(\pm a/2) \exp[-\varkappa_l (|z| - a/2)]. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь a — ширина квантовой ямы, A, B, C, D — не зависящие от z коэффициенты, точка $z = 0$ выбрана в центре ямы,

$$\begin{aligned} k_h &= (2m_{hh}\varepsilon/\hbar^2)^{1/2}, \quad k_l = (2m_{lh}\varepsilon/\hbar^2)^{1/2} = (m_{lh}/m_{hh})^{1/2} k_h, \\ \varkappa_h &= [2m'_{hh}(V - \varepsilon)/\hbar^2]^{1/2}, \quad \varkappa_l = (m'_{lh}/m'_{hh})^{1/2} \varkappa_h, \end{aligned} \quad (7)$$

ε — энергия дырки, V — высота барьера (т.е. разрыв валентной зоны на интерфейсе). Отметим, что для электронов в зоне проводимости высота барьера равна $\Delta E_g - V$, где ΔE_g — разность ширины запрещенных зон в композиционных материалах. В структуре с общим анионом коэффициенты смешивания t_{l-h}^L, t_{l-h}^R соответственно на левом и правом интерфейсах совпадают, вследствие чего коэффициенты B и C в (5) обращаются тождественно в нуль и $F(a/2) = F(-a/2), G(a/2) = -G(-a/2)$. При $t_{l-h}^L \neq t_{l-h}^R$ функции $F(z), G(z)$ не обладают определенной четностью по отношению к изменению знака z .

Согласно (1), (5), в поляризации света $\mathbf{e} \perp z$ разрешены междузонные оптические переходы с возбуждением электронно-дырочной пары ($e1, -1/2; hh1, 3/2$) и ($e1, 1/2; hh1, -3/2$). При линейной поляризации для квадрата модуля матричных элементов получаем

$$\begin{aligned} |M_{-1/2, 3/2}(\mathbf{e})|^2 &= |M_{1/2, -3/2}(\mathbf{e})|^2 \\ &= M_0^2 \left(I_1^2 + \frac{1}{3} I_2^2 + \frac{2}{\sqrt{3}} I_1 I_2 \cos 2\phi \right), \end{aligned} \quad (8)$$

где M_0 — константа, ϕ — угол между плоскостью поляризации и осью [110],

$$I_1 = \int K(z) F(z) dz, \quad I_2 = \int K(z) G(z) dz.$$

В соответствии с соображениями симметрии поглощение света имеет экстремумы при $\phi = 0$ ($\mathbf{e} \parallel [110]$) и $\phi = \pi/2$ ($\mathbf{e} \parallel [1\bar{1}0]$). Согласно (8), в периодической структуре с квантовыми ямами анизотропия коэффициента поглощения α описывается соотношением

$$\rho \equiv \frac{\alpha_{[110]} - \alpha_{[1\bar{1}0]}}{\alpha_{[110]} + \alpha_{[1\bar{1}0]}} = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{I_1 I_2}{I_1^2 + (I_2^2/3)} \approx \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{I_2}{I_1}. \quad (9)$$

В квантовой яме, выращенной из материалов с различным катионно-анионным составом, в отсутствие электрического поля величина оптической анизотропии определяется разницей параметра смешивания "тяжелая-легкая дырка" t_{l-h} для гетерограниц СА/С'А' и С'А'/СА. При этом предполагается, что потенциальные барьеры на левом и правом интерфейсах одинаковы. Рис. 3

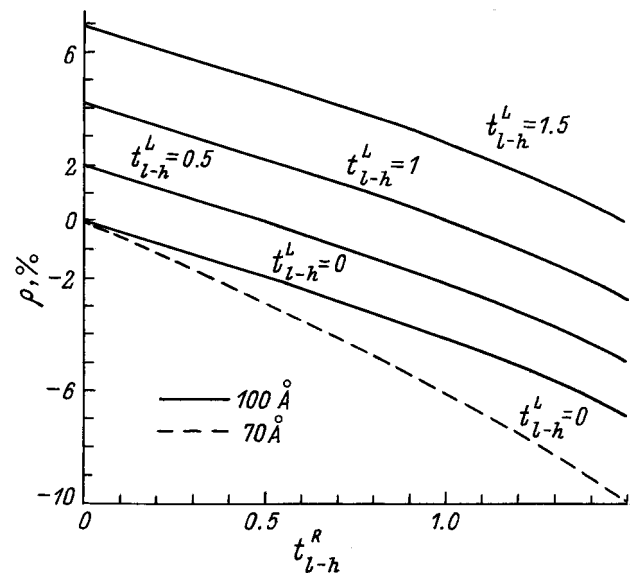


Рис. 3. Относительная анизотропия коэффициента поглощения в периодической структуре с квантовыми ямами Ga_{0.47}In_{0.53}As/InP в зависимости от безразмерного коэффициента смешивания "тяжелая-легкая дырка" t_{l-h}^R на правом интерфейсе при фиксированных значениях t_{l-h}^L . Сплошные кривые рассчитаны для ям шириной $a = 100 \text{ \AA}$, штриховая — для $a = 70 \text{ \AA}$.

Таблица 1. Параметры материалов, составляющих гетеропару

	E_g , eV	m_e/m_0	m_{hh}/m_0	m_{lh}/m_0
GaInAs	0.81	0.041	0.377	0.052
InP	1.42	0.077	0.65	0.12

иллюстрирует зависимости анизотропии коэффициента поглощения от параметров смешивания на левом (t_{l-h}^L) и правом (t_{l-h}^R) интерфейсах. Расчет проводился по формуле (9) для квантовых ям Ga_{0.47}In_{0.53}As/InP с толщинами 100 Å (сплошные линии) и 70 Å (штриховая линия). Основные параметры материалов приведены в табл. 1, используемые значения разрывов зон составляли $\Delta E_c = 0.262$ eV и $\Delta E_v = 0.348$ eV соответственно для зоны проводимости и валентной зоны. При фиксированном значении t_{l-h}^L , приведенные на рис. 3 зависимости от t_{l-h}^R меняют знак при равенстве $t_{l-h}^L = t_{l-h}^R$, что соответствует симметричной квантовой яме. Уменьшение ширины ямы обуславливает рост интерфейсного вклада и, как следствие, большую крутизну зависимости $\rho(t_{l-h}^R)$ для более узкой квантовой ямы.

2. Анизотропия, наведенная электрическим полем

В объемном полупроводнике с решеткой цинковой обманки электрическое поле $\mathbf{E} \parallel [001]$ приводит к линейному по полю двулучепреломлению с главными осями тензора диэлектрической проницаемости, ориентированными по трем направлениям $[1\bar{1}0]$, $[110]$ и $[001]$. Два механизма эффекта Поккельса в структурах с квантовыми ямами обсуждались в работе [9]. Один из них связан с одноосной деформацией $u_{xy} \propto E$ ($x \parallel [100]$, $y \parallel [010]$), индуцированной электрическим полем (пьезоэлектрический эффект), и вызванным этой деформацией смешиванием состояний тяжелых и легких дырок, т.е. вкладом в функцию $G(z)$ в (3) и в интеграл перекрытия I_2 , пропорциональным u_{xy} . Второй механизм носит чисто электронный характер: нужно учесть, что в полупроводнике класса T_d междузонный матричный элемент оператора импульса $\langle c, s, \mathbf{k} | \mathbf{ep} | v, m, \mathbf{k} \rangle$ содержит слагаемые, линейные по волновому вектору электрона \mathbf{k} . При $\mathbf{k} \parallel z$ имеем

$$\langle c, 1/2, k_z | \mathbf{ep} | v, 3/2, k_z \rangle = -P e_+ - Q k_z e_-,$$

$$\langle c, -1/2, k_z | \mathbf{ep} | v, -3/2, k_z \rangle = P e_- - Q k_z e_+,$$

где \mathbf{e} — единичный вектор поляризации света, $e_{\pm} = e_x \pm i e_y$, P и Q — константы. При расчете оптической анизотропии в методе плавных огибающих нужно заменить k_z на оператор $-id/dz$. В нижшем

порядке по малым параметрам I_2/I_1 и $Q/(aP)$ получаем

$$\rho = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{I_2}{I_1} - \frac{2Q}{aP} \frac{I_3}{I_1}, \quad (10)$$

где $I_3 = a \int dz K dF/dz$, множитель a введен для удобства, чтобы величины I_1 , I_2 , I_3 имели одну размерность. В электрическом поле огибающая $F(z)$ становится асимметричной даже при $t_{l-h}^{L,R} = 0$ и интеграл I_3 отличен от нуля.

Наряду с указанными двумя объемными механизмами, в квантовых ямах с $t_{l-h}^L, t_{l-h}^R \neq 0$ имеется дополнительный, интерфейсный, механизм эффекта Поккельса. Действительно, в электрическом поле значения огибающей $G(z)$ на интерфейсах меняются, согласно (4) это приводит к изменению в (3) степени подмешивания состояний $|\Gamma_8, \mp 1/2\rangle$ к состояниям $|\Gamma_8, \pm 3/2\rangle$, а значит и к изменению интеграла перекрытия I_2 . На рис. 4 приведены зависимости от электрического поля оптической анизотропии, обусловленной интерфейсным вкладом. Кривые рассчитаны для различных комбинаций значений t_{l-h}^L и t_{l-h}^R , указанных в подписи к рисунку, остальные параметры соответствуют квантовой яме Ga_{0.47}In_{0.53}As/InP шириной 100 Å.

До сих пор предполагалось, что потенциальные барьеры на интерфейсах $C'A'/CA$ и $CA/C'A'$ совпадают. Однако при $C \neq C'$, $A \neq A'$ эффективные дипольные моменты, отвечающие связям $C-A'$ и $C'-A$, в общем случае различаются и разность разрывов зон V_L и V_R на левом и правом интерфейсах может достигать $50 \div 100$ meV [7–10]. В равновесии это различие при-

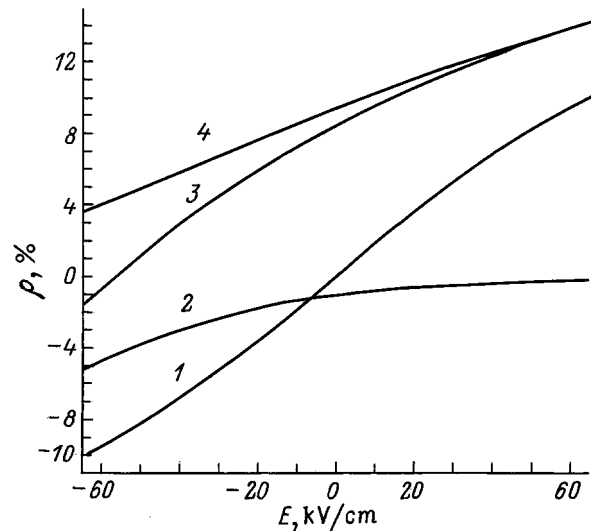


Рис. 4. Зависимость латеральной анизотропии поглощения света от внешнего электрического поля в структуре с квантовыми ямами Ga_{0.47}In_{0.53}As/InP шириной 100 Å. 1 — расчет для симметричной ямы с $t_{l-h}^L = t_{l-h}^R = 1$ и одинаковыми разрывами зон $\Delta V = 348$ meV, 2–4 — расчет для асимметричной ямы с $\Delta V_L = 318$ meV, $\Delta V_R = 378$ meV и со встроенным электрическим полем 60 kV/cm, коэффициенты смешивания t_{l-h}^L, t_{l-h}^R выбраны равными соответственно 1, 0 (2), 1, 1 (3), 0, 1 (4).

водит к формированию встроенного электрического поля, выравнивающего электрохимический потенциал. На рис. 4 кривые, отмеченные цифрами 2, 3 и 4, рассчитаны для некоммутативных интерфейсов, тогда как кривая 1 соответствует симметричной квантовой яме. В данной работе не ставилась задача точно рассчитать профиль внутреннего поля и для простоты к внешнему электрическому полю добавлялось поле $E_0(z) = (V_R - V_L)/(|e|a)$ в яме и = 0 в барьерах (e — заряд электрона). Положительные значения по оси абсцисс рис. 4 соответствуют направлению вектора напряженности внешнего электрического поля \mathbf{E} от левого к правому интерфейсу, что соответствует также и направлению встроенного поля в яме $E_0 = 60 \text{ kV/cm}$. Кривая 3 рассчитана в предположении равенства $t_{l-h}^L = t_{l-h}^R = 1$. При этом ненулевое значение степени анизотропии ($\approx 8\%$), наблюдаемое при $E = 0$, определяется в основном эффектом встроенного поля. Приложение отрицательного внешнего поля компенсирует встроенное и, соответственно, уменьшает степень анизотропии. Кривые 2, 4 иллюстрируют индуцированную электрическим полем неравноценность вкладов левого и правого интерфейсов в эффект анизотропии. Увеличение положительного внешнего поля обуславливает поляризацию волновых функций электрона и дырки, увеличивая относительный вклад правого интерфейса, вблизи которого значения дырочных функций максимальны. Вклад левого интерфейса с ростом поля стремится к нулю, а кривые 2 ($t_{l-h}^L = 1, t_{l-h}^R = 0$) и 4 ($t_{l-h}^L = 0, t_{l-h}^R = 1$) асимптотически приближаются к нулевому значению ($t_{l-h}^L = 0, t_{l-h}^R = 0$) и к кривой 3 ($t_{l-h}^L = 1, t_{l-h}^R = 1$) соответственно. Кривая 1, рассчитанная для симметричной квантовой ямы с коммутативными интерфейсами ($t_{l-h}^L = t_{l-h}^R = 1, V_L = V_R$), естественно, симметрична относительно начала координат.

3. Связь между моделью сильной связи и методом плавных огибающих

Для оценки коэффициентов в граничных условиях для огибающих φ_m мы воспользуемся эмпирической моделью сильной связи sp^3s^* в приближении взаимодействия ближайших соседей [11]. Ранее эта модель была использована для вывода граничных условий на гетеропереходе между двумя полупроводниками с общим анионом [2,12]. При $\mathbf{k} \parallel z$ волновая функция электрона в валентной зоне разлагается по планальным атомным орбиталам

$$\psi_\alpha(\mathbf{r}) = \sum_n C_n \phi_{n\alpha}(\mathbf{r} - z_n \mathbf{e}_z), \quad (11)$$

где $z_n = na_0/4$, a_0 — постоянная решетки, \mathbf{e}_z — единичный вектор в направлении оси [001], $\phi_{n\alpha}$ — планальная орбиталь для моноатомного слоя катионов (нечетные n) или анионов (четные n). На начальном этапе спин не учитывается и выводятся граничные условия для

огибающих при блоховских функциях $(|X\rangle + |Y\rangle)/\sqrt{2}$ и $(|X\rangle - |Y\rangle)/\sqrt{2}$, преобразующихся по одномерным представлениям Δ_3, Δ_4 группы волнового вектора в точке Δ . Поэтому в (11) $\alpha = \Delta_3, \Delta_4$, а соответствующие орбитали равны $(p_x + p_y)/\sqrt{2}$ или $(p_x - p_y)/\sqrt{2}$. Для определенности мы рассмотрим, как сшиваются состояния Δ_3 на гетеропереходе $CA/C'A'$, интерфейсным монослоем A и C' приписываются соответственно номера $n = 0$ и $n = 1$. В дальнейшем используются следующие обозначения для параметров модели сильной связи: E_c, E_a — диагональные энергии для катионных или анионных p -орбиталей, $V_{\gamma\delta}$ — матричный элемент сильной связи между анионной орбиталью p_γ и катионной орбиталью p_δ в объемном полупроводнике CA ($\gamma, \delta = x, y$), $E'_c, E'_a, V'_{\gamma\delta}$ — аналогичные параметры для материала $C'A'$, \tilde{E}_a и \tilde{E}_c — диагональные энергии для интерфейсных атомов A и C' , $\tilde{V}_{\gamma\delta}$ — матричный элемент связи для пары AC' .

Для решений Δ_3 в объемном полупроводнике CA коэффициенты удовлетворяют системе линейных уравнений

$$\begin{aligned} U_- C_{2l-1} + (E_a - E) C_{2l} + U_+ C_{2l+1} &= 0, \\ U_+ C_{2l} + (E_c - E) C_{2l+1} + U_- C_{2l+2} &= 0, \end{aligned} \quad (12)$$

где E — энергия электрона, $U_\pm = (V_{xx} \pm V_{yy})/2$ и l — целое число. Решения Δ_4 удовлетворяют аналогичной системе уравнений, в которой U_+ и U_- меняются местами. В электронном представлении дисперсия валентных состояний Δ_3 или Δ_4 имеет вид

$$E(k, CA) = \frac{1}{2}(E_a + E_c) - D_k, \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned} D_k &= \sqrt{\Delta^2 + V_k V_{-k}}, \quad \Delta = \frac{1}{2}(E_c - E_a), \\ V_k &= U_- e^{ika_0/4} + U_+ e^{-ika_0/4}. \end{aligned} \quad (14)$$

Волновый вектор $\mathbf{k} = (0, 0, k)$ принимает вещественные значения в пределах разрешенной зоны и мнимые, если энергия лежит в запрещенной зоне. Для заданного значения k коэффициенты C_n можно представить в форме

$$C_n(k) = f_k \begin{cases} \eta_k e^{ikz_n} & \text{при четных } n, \\ \xi_k e^{ikz_n} & \text{при нечетных } n, \end{cases} \quad (15)$$

где f_k — произвольный множитель,

$$\eta_k = \left(\frac{D_k + \Delta}{2D_k} \right)^{1/2}, \quad \xi_k = -\eta_k \frac{V_k}{D_k + \Delta}. \quad (16)$$

В объемном материале $C'A'$ уравнения для C_n получаются заменой $E_a, E_c, V_k, \Delta, D_k, U_\pm, f_k$ на $E'_a, E'_c, V'_k, \Delta', D'_k, U'_\pm, f'_k$. В гетероструктуре решения строятся в виде линейных комбинаций волн k и $-k$ в материале CA и волн $k', -k'$ в материале $C'A'$, где k и k' удовлетворяют

дисперсионным уравнениям $E = E(k, CA) = E(k', C'A')$. Соответственно коэффициенты C_n принимают вид

$$C_n = \begin{cases} C_n(k, CA) + C_n(-k, CA), & n \leq 0, \\ C_n(k', C'A') + C_n(-k', C'A'), & n \geq 1. \end{cases} \quad (17)$$

Множители $f_{\pm k}$, $f_{\pm k'}$ связаны между собой двумя "интерфейсными" уравнениями

$$\begin{aligned} U_- C_{-1} + (\tilde{E}_a - E) C_0 + \tilde{U}_+ C_1 &= 0, \\ \tilde{U}_+ C_0 + (\tilde{E}'_c - E) C_1 + U'_- C_2 &= 0. \end{aligned} \quad (18)$$

Учтем теперь, что роль огибающей в методе эффективной массы играет функция

$$f(z) = f_k e^{ikz} + f_{-k} e^{-ikz}. \quad (19)$$

Используя уравнение (18), можно вывести граничные условия, связывающие $f(0) = f_k + f_{-k}$ и первую производную $df(0)/dz = ik(f_k - f_{-k})$ с $f'(0) = f_{k'} + f_{-k'}$, $df'(0)/dz = ik'(f_{k'} - f_{-k'})$. В результате получим

$$\begin{aligned} f(0) &= t_{11} f'(0) + t_{12} \dot{f}'(0), \\ \dot{f}'(0) &= t_{21} f'(0) + t_{22} \dot{f}'(0), \end{aligned} \quad (20)$$

$\dot{f}' \equiv a_0(m_0/M)(df/dz)$, эффективная масса $M = \hbar^2 d(dE/dk)^{-1}$,

$$t_{11} = \frac{1}{\eta} \left(\eta' \frac{U'_+}{\tilde{U}_+} - \frac{E'_c - \tilde{E}'_c}{\tilde{U}_+ U'_+} S'_+ \right), \quad t_{12} = \frac{1}{\eta \eta'} \frac{E'_c - \tilde{E}'_c}{\tilde{U}_+ U'_+} \frac{\hbar^2}{m_0 a_0^2},$$

$$\begin{aligned} t_{21} &= \frac{m_0 a_0^2 \eta}{\hbar^2} \frac{\eta}{2} \left\{ [S_+ - S_- + \eta (2\tilde{E}_a - E_a - E)] t_{11} - 2S'_+ \frac{\tilde{U}_+}{U'_+} \right\}, \\ t_{22} &= \frac{\eta}{\eta' U'_+} \tilde{U}_+ + \frac{\eta}{2} \frac{m_0 a_0^2}{\hbar^2} t_{12} [S_+ - S_- + \eta (2\tilde{E}_a - E_a - E)]. \end{aligned} \quad (21)$$

Здесь использованы обозначения

$$\begin{aligned} S_{\pm} &= \frac{U_{\pm}(U_{\pm} + U_{\mp} \cos ka_0/2)}{\sqrt{2D(D + \Delta)}}, \\ S'_{\pm} &= \frac{U'_{\pm}(U'_{\pm} + U'_{\mp} \cos k'a_0/2)}{\sqrt{2D'(D' + \Delta')}}. \end{aligned} \quad (22)$$

$\eta = \eta(k)$, $\eta' = \eta'(k')$, $D = D_k$, $D' = D_{k'}$. При выводе (22) учтено тождество $S'_+ + S'_- = \eta'(E'_a - E)$. Можно проверить, что матрица t_{ij} унимодулярна: $t_{11}t_{22} - t_{12}t_{21} = 1$. Для гетеропары типа GaAs/AlAs получаем результат работы [2]: в гетероструктурах с общим анионом $\tilde{E}'_c = E'_c$, $\tilde{E}_a = (E_a + E'_a)/2$, $\tilde{U}_+ = U'_+$ и $t_{11} = \eta'/\eta$, $t_{12} = 0$, $t_{22} = \eta/\eta'$,

$$\begin{aligned} t_{21} &= \frac{m_0 a_0^2}{2\hbar^2} \left[\eta'(S_+ - S_-) - \eta(S'_+ - S'_-) \right] \\ &= \frac{m_0 a_0^2}{2\hbar^2} \left(\frac{V_{xx} V_{xy}}{D + \Delta} - \frac{V'_{xx} V'_{xy}}{D' + \Delta'} \right). \end{aligned} \quad (23)$$

Таблица 2. Используемые при расчете значения параметров материалов

	a_0	V_{xx}	V_{xy}	E_a	E_c
InP	5.8688	1.6888	4.1213	0.7090	3.792
GaInAs	5.8679	1.1636	4.4547	0.2331	3.8352
GaInP	5.6725	1.3812	3.6936	0.4771	3.7600
InAs	6.0583	1.3013	4.8025	0.2697	4.1464

Таблица 3. Рассчитанные значения коэффициентов t_{ij}

	InAs (Δ_3)	InAs (Δ_4)	GaInP (Δ_3)	GaInP (Δ_4)
t_{11}	0.9415	0.6872	1.2160	0.8050
t_{12}	0.0000	0.0000	-0.0157	-0.0825
t_{21}	-2.3957	2.7657	-0.2881	1.2582
t_{22}	1.0621	1.4551	0.8261	1.1132

Выражения (21) позволяют связать значения элементов матрицы t_{ij} с микроскопическими параметрами модели сильной связи. Вычисления были проделаны для двух возможных типов интерфейса гетероструктуры $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.55}\text{As}/\text{InP}$: 1) типа InAs в последовательности атомарных плоскостей $-(\text{GaIn})-\text{As}-(\text{GaIn})-[\text{As}-\text{In}]-\text{P}-\text{In}-\text{P}$; 2) типа GaInP в последовательности $-\text{In}-\text{P}-\text{In}-[\text{P}-(\text{GaIn})]-\text{As}-(\text{GaIn})-\text{As}$, где интерфейсные атомы заключены в квадратные скобки. В табл. 2 приведены значения используемых параметров, а в табл. 3 представлены результаты расчета коэффициентов t_{ij} в граничных условиях (20) при энергии E , близкой к поголовку валентной зоны GaInAs. Диагональные энергии \tilde{E}_a , \tilde{E}'_c выбирались в соответствии с моделью сильной связи, использованной в [8]: $\tilde{E}_a = E_a(\text{GaInAs})$, $\tilde{E}'_c = E_c(\text{InP})$ для интерфейса InAs и $\tilde{E}_a = E_a(\text{InP})$, $\tilde{E}'_c = E_c(\text{GaInAs})$ для интерфейса GaInP, разрыв валентной зоны полагался равным $\delta E_v = 0.348$ eV. Как видно из табл. 3, диагональные коэффициенты t_{11} , t_{22} близки к единице, а коэффициент t_{12} гораздо меньше остальных. При $t_{11}, t_{22} \approx 1$ коэффициент смешивания на интерфейсе орбиталей $|X\rangle, |Y\rangle$ (без учета спин-орбитального взаимодействия) равен $t_{X-Y} = [t_{21}(\Delta_3) - t_{21}(\Delta_4)]/2$, а коэффициент смешивания "тяжелая-легкая дырка" в (2) равен $t_{l-h} = t_{X-Y}/\sqrt{3}$ [2]. Из табл. 3 следует, что коэффициенты t_{lh} на интерфейсах типа InAs и GaInP принимают значения -2.58 и -0.77 , т.е. различаются более чем в 3 раза. Используемая здесь модель сильной связи носит приближенный характер и служит лишь для оценки абсолютных значений коэффициентов t_{l-h}^L , t_{l-h}^R и различия между ними, ответственного за латеральную анизотропию. Для нахождения точных значений этих коэффициентов требуется детальное сопоставление с экспериментом, что выходит за рамки данной работы. На рис. 3 максимальная оптическая анизотропия составляет $\approx 10\%$ в согласии с расчетом в модели сильной связи [8]. Экспериментальные

значения [7,8] относительной анизотропии поглощения ρ превышают теоретические в 2–3 раза. Возможно, наряду с собственным механизмом, проанализированным в данной работе, вклад в латеральную анизотропию вносят несовершенства интерфейсов: островки, ступени или полоски, ориентированные преимущественно в направлении [110] или $[1\bar{1}0]$. Тем не менее, из сравнения теории с экспериментом следует, что вклад собственного механизма в ρ не мал, а в образцах с более совершенными интерфейсами он заведомо превысит несобственный вклад.

Работа поддержана грантом Российского фонда фундаментальных исследований № 98-02-18206, а также фондом Volkswagen.

Список литературы

- [1] Y. Fu, M. Willander, E.L. Ivchenko, A.A. Kiselev. Phys. Rev. **B47**, 20, 13 498 (1993); E.L. Ivchenko, A.A. Kiselev, Y. Fu, M. Willander. Phys. Rev. **B50**, 11, 7747 (1994).
- [2] Е.Л. Ивченко, А.Ю. Каминский, И.Л. Алейнер. ЖЭТФ **104**, 4, 3401 (1993); E.L. Ivchenko, A.Yu. Kaminski, U. Rössler. Phys. Rev. **B54**, 8, 5852 (1996).
- [3] B.R. Bennett, B.V. Shanabrook, R.J. Wagner, J.L. Davis, J.R. Waterman. Appl. Phys. Lett. **63**, 7, 949 (1993).
- [4] P.M. Thibado, B.R. Benett, M.E. Twigg, B.V. Shanabrook, L.J. Whitman. Appl. Phys. Lett. **67**, 24, 3578 (1995).
- [5] A.Y. Lew, S.L. Zuo, E.T. Yu, R.H. Miles. Appl. Phys. Lett. **70**, 1, 75 (1997).
- [6] O. Krebs, P. Voisin. Phys. Rev. Lett. **77**, 7, 1829 (1996).
- [7] O. Krebs, W. Seidel, P. Voisin. Inst. Phys. Conf. Ser. № 155, Ch. 12. Proc. 23rd Int. Symp. Compound Semiconductors (St.Petersburg 1996) / Ed. M.S. Shur and R.A. Suris (1997). P. 859.
- [8] O. Krebs, W. Seidel, J.P. André, D. Bertho, C. Jouanin, P. Voisin. Semicond. Sci. Technol. **12**, 7, 938 (1997).
- [9] S.H. Kwok, H.T. Grahn, K. Ploog, R. Merlin. Phys. Rev. Lett. **69**, 6, 973 (1992).
- [10] W. Seidel, O. Krebs, P. Voisin, J.C. Harmand, F. Aristone, J.F. Palmier. Phys. Rev. **B55**, 4, 2274 (1997).
- [11] P. Vogl, H.P. Hjalmarson, J.D. Dow. J. Phys. Chem. Sol. **44**, 5, 365 (1983).
- [12] А.Ю. Каминский. Канд. дис. ФТИ РАН (1996).