

Скорость излучательной рекомбинации в квантово-размерных структурах в модели без правила отбора

© А.А. Афоненко, В.К. Кононенко*, И.С. Манак, В.А. Шевцов

Белорусский государственный университет,
220080 Минск, Белоруссия

* Институт физики им. Б.И. Степанова Академии наук Белоруссии,
220072 Минск, Белоруссия

(Получена 20 марта 1996 г. Принята к печати 10 февраля 1997 г.)

Изучено влияние размерного квантования на вероятность оптических переходов без выполнения правила отбора по волновому вектору электрона. Показано, что в предположении постоянства инжекционной эффективности величина тока инверсии практически не зависит от толщины квантово-размерного слоя. Обсуждаются различные приближения для расчета скорости спонтанной рекомбинации.

Модель оптических переходов без выполнения правила отбора по волновому вектору электрона была развита для описания свойств инжекционных лазеров с легированной активной областью [1]. Она учитывает бимолекулярный характер рекомбинации и отражает влияние несовершенств реальных лазерных структур на спектры испускания [2]. Эта модель используется также для анализа пороговых и спектральных характеристик квантово-размерных гетеролазеров [3–6].

Однако расчет порога и тока инверсии в квантово-размерных лазерах с использованием вероятности оптических переходов без правила отбора для объемных полупроводников приводит к довольно большим значениям этих величин. Скорость спонтанной излучательной рекомбинации в квантово-размерном слое толщиной d в модели без правила отбора рассчитывается в этом случае как

$$R_{sp} = A \frac{n_1 p_1}{d^2}, \quad (1)$$

где A — постоянный коэффициент, n_1 и p_1 — поверхностные концентрации электронов и дырок соответственно.

При заданных n_1 и p_1 выражение (1) дает возрастание скорости рекомбинации при уменьшении толщины слоя обратно пропорционально d^2 . Этот результат существенно отличается от поведения скорости рекомбинации, рассчитанной для оптических переходов с выполнением правила отбора по волновому вектору электрона, когда R_{sp} обратно пропорционально d [7]. Несоответствие предсказаний двух моделей — следствие того, что скорость рекомбинации, согласно (1), получена при использовании вероятности переходов для объемного полупроводника [1], а концентрация неравновесных носителей рассчитывается как для квантовой ямы. В данной работе изучено влияние размерного квантования на вероятность оптических переходов без выполнения правила отбора и рассмотрены способы расчета спектров спонтанной рекомбинации в квантовых ямах.

Число спонтанных переходов в единицу времени в единичном объеме в расчете на единичный интервал

энергий по определению рассчитывается как

$$r_{sp}(\hbar\omega) = \frac{1}{V} \sum_i \sum_f \omega_{fi} f_{ei} f_{hf} \delta(E_i - E_f - \hbar\omega). \quad (2)$$

Здесь суммирование проводится по всем начальным состояниям в зоне проводимости i и всем конечным состояниям в валентной зоне f , величина ω_{fi} определяет вероятность перехода между состояниями. Функции Ферми–Дирака для электронов f_{ei} и дырок f_{hf} учитывают заполнение состояний, V — объем квантово-размерного слоя. Энергии начального и конечного состояний составляют E_i и E_f соответственно; δ -функция выделяет из суммирования только переходы с энергией $\hbar\omega$. Вероятность прямых оптических переходов электрона из зоны проводимости в валентную зону есть $\omega_{n_c \mathbf{k}_c n_v \mathbf{k}_v} = A_{cv} \delta_{\mathbf{k}_c \mathbf{k}_v} \delta_{n_c n_v}$, где A_{cv} — коэффициент Эйнштейна для межзонных переходов, n_c , \mathbf{k}_c и n_v , \mathbf{k}_v — номера подзон и волновые векторы электрона в зоне проводимости и валентной зоне соответственно.

В квантово-размерных слоях часто удобно использовать "поверхностную" скорость спонтанной рекомбинации (число переходов в единицу времени в расчете на единичную площадь и единичный интервал энергий) r_{sp1} . При этом предполагается

$$S r_{sp1}(\hbar\omega) \equiv V r_{sp}(\hbar\omega), \quad (3)$$

где $S = V/d$ — площадь квантово-размерного слоя.

Пороговый ток лазера можно оценить по току инверсии [2,7]. Ток инверсии определяется степенью возбуждения квантовой ямы, когда разность квазиуровней Ферми для электронов и дырок $\Delta F = F_e - F_h$ равна минимальной энергии испускаемых квантов $\hbar\omega_{\min}$. В предположении, что инжекционная эффективность и квантовый выход люминесценции близки к 1, для плотности тока инверсии имеем

$$j_{inv} = ed R_{sp} \Big|_{\Delta F = \hbar\omega_{\min}}. \quad (4)$$

Рассчитаем $r_{sp}(\hbar\omega)$ для легированного квантово-размерного слоя. Считаем, что волновые функции

состояний одной из зон невозмущены и имеют вид $\psi_{nk_c} = \sqrt{2/V} \exp[i(k_x x + k_y y)] \sin(\pi n z/d + \pi n/2)$, где k_x, k_y — проекции волнового вектора \mathbf{k}_c в плоскости (x, y) , z — координата в направлении нормали к квантово-размерному слою. Здесь для простоты использовано приближение бесконечных потенциальных барьеров. Состояния другой зоны ψ_l локализованы вблизи примесей [1,8]. Вероятность перехода электрона в квантовой яме с уровнем подзоны с номером n на основной уровень примеси будет отличаться от A_{cv} квадратом интеграла перекрытия волновых функций

$$\omega_{lnk_c} = A_{cv} \left\langle \left| \int_V \psi_l^* \psi_{nk_c} dV \right|^2 \right\rangle, \quad (5)$$

где усреднение, обозначенное скобками $\langle \rangle$, проводится по всем возможным положениям примесей в квантово-размерном слое $-d/2 \leq z_0 \leq d/2$. Интегрирование в (5) производится по объему квантово-размерного слоя V .

Далее рассмотрим два случая.

1. $d \gg a_0$, где a_0 — эффективный борковский радиус примеси. В этом случае размерным квантованием в направлении z , перпендикулярном плоскости слоя, для локализованных на примесях частиц можно пренебречь, и волновая функция состояния примеси с координатой \mathbf{r}_0 имеет вид

$$\psi_l = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}{a_0}\right). \quad (6)$$

Так как основной вклад в интеграл (5) вносит область вблизи примеси, то интегрирование можно распространить на бесконечный объем. Тогда находим

$$\omega_{lnk_c}(z_0) \approx A_{cv} \frac{64\pi a_0^3}{V \left[1 + a_0^2 \left(k_c^2 + \frac{\pi^2 n^2}{d^2}\right)\right]^4} \times 2 \sin^2\left(\frac{\pi n z_0}{d} + \frac{\pi n}{2}\right). \quad (7)$$

После усреднения по z_0 результат примет вид

$$\omega_{lnk_c}(z_0) \approx A_{cv} \frac{64\pi a_0^3}{V \left[1 + a_0^2 \left(k_c^2 + \frac{\pi^2 n^2}{d^2}\right)\right]^4}. \quad (8)$$

Это выражение аналогично вероятности переходов, получающейся в приближении плоских волн с z -компонентом волнового вектора электрона $k_z = \pi n/d$ [1,8].

Так как полученная вероятность переходов зависит только от энергии носителей в подзонах

$$E_c = E_{c0} + \hbar^2(k_c^2 + \pi^2 n^2/d^2)/2m_c,$$

где m_c — эффективная масса электрона, то в (2) легко перейти от суммирования по состояниям к интегрированию

по энергии. Причем, согласно проводимому рассмотрению, для зоны проводимости необходимо использовать двумерную плотность состояний

$$\rho_{c1}(E) = \frac{m_c}{\pi \hbar^2} \sum_n H(E - E_{c0} - E_{cn}), \quad (9)$$

а для примесной зоны, перекрывающейся с валентной зоной — как для полупроводника с объемными свойствами — плотность $\rho_v(E)$, так как, по предположению, наличие потенциальных барьеров не влияет на энергетический спектр дырок. Здесь E — энергия уровней, участвующих в переходах, E_{c0} — дно зоны проводимости, E_{cn} — значения энергий краев подзон с номером $n = 1, 2, \dots$ в зоне проводимости, H — единичная функция Хевисайда [$H(x) = 1$ при $x \geq 0$ и $H(x) = 0$ при $x < 0$]. Без учета хвоста плотности состояний $\rho_v(E)$ может в первом приближении считаться равной обычной объемной плотности

$$\rho_v(E) = \frac{(2m_v)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} (E_{v0} - E)^{1/2}, \quad (10)$$

где m_v — эффективная масса дырок для плотности состояний E_{v0} — потолок валентной зоны.

Пренебрегая в (8) зависимостью ω_{lnk_c} от волнового вектора электрона, а также ограничиваясь $n = 1$, окончательное выражение для скорости спонтанных переходов запишем в виде

$$r_{sp}(\hbar\omega) = \frac{A_0}{d} \int_{E_{c0}+E_{c1}}^{E_{v0}+\hbar\omega} \rho_{c1}(E) \rho_v(E - \hbar\omega) f_e(E) f_h(E - \hbar\omega) dE. \quad (11)$$

Здесь $A_0 = (1/2)64\pi a_0^3 A_{cv} / (1 + \pi^2 a_0^2/d^2)^4$ — вероятность оптического перехода без правила отбора, f_e и f_h — соответствующие функции распределения электронов и дырок. Множитель $1/2$ появляется как результат учета сохранения спина электрона при переходах.

Суммарная скорость рекомбинации получается интегрированием (11) по всем возможным энергиям испускаемых фотонов:

$$R_{sp} = A_0 \frac{n_1}{d} p, \quad (12)$$

где p — объемная концентрация дырок в квантово-размерном слое. Вероятность оптического перехода без правила отбора A_0 , совпадающая с объемным результатом [1,8], в предельном случае $d \rightarrow \infty$ начинает заметно падать с уменьшением ширины квантовой ямы при $d \simeq 10a_0$.

2. При дальнейшем уменьшении ширины квантовой ямы необходимо учитывать квантовые эффекты ограничения локализованных на примесях носителей в направлении, перпендикулярном плоскости слоя. В простейшей модели валентной зоны можно ограничиться рассмотрением только тяжелых дырок [9]. Тогда волновая функция основного состояния примеси представляется в виде

$$\psi_l = \frac{1}{\sqrt{N(a, d)}} \exp\left(-\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}{a}\right) \cos\left(\frac{\pi z}{d}\right), \quad (13)$$

где постоянная нормировки равна

$$N(a, d) = \frac{\pi a^3}{2} \left\{ 1 + \frac{\cos\left(\frac{2\pi z_0}{d}\right)}{\left[\left(\frac{\pi a}{d}\right)^2 + 1\right]^2} + \frac{\exp\left(-\frac{d}{a}\right)}{1 + \left(\frac{d}{\pi a}\right)^2} \right. \\ \times \left[\frac{z_0}{a} \sinh\left(\frac{2z_0}{a}\right) \left[1 + \frac{d}{2a} + \frac{1}{\left(\frac{\pi a}{d}\right)^2 + 1} \right] \right. \\ \left. \left. \times \cosh\left(\frac{2z_0}{a}\right) \right] \right\}. \quad (14)$$

Здесь характерный размер a находится вариационным методом по энергии состояния [9]. При аппроксимации $d \rightarrow 0$ эта процедура приводит к $a \rightarrow a_0/2$. С увеличением ширины квантовой ямы значение a быстро приближается к a_0 : при $d = a_0$ параметр локализации носителей на примесях, расположенных в центре ямы, составляет $a \approx 0.8a_0$. Приближение (13) не учитывает эффекта проникновения волновых функций в барьерные слои в случае конечной высоты потенциальных барьеров, что способствует увеличению a . Поэтому используем далее $a \approx a_0$.

Интегрирование (5) элементарно выполняется в двумерном пределе $d = 0$:

$$\omega_{lnk_c} = A_{cv} \frac{8\pi a^2}{S(1 + a^2 k_c^2)^3} \delta_{n1}. \quad (15)$$

По аналогии со случаем широкой квантовой ямы полагаем, что для расчета скорости рекомбинации достаточно знать величину (5) при нулевом волновом векторе электрона. Тогда вероятность переходов между основными уровнями подзон при произвольном d находится непосредственно с помощью (14):

$$\omega_{l10}(d) = A_{cv} \frac{2}{V} \left\langle \frac{N^2(2a, d)}{N(a, d)} \right\rangle, \quad (16)$$

где $a \approx a_0$. Для узких квантовых ям нормировочная константа линейно зависит от ширины: $N(a, d) \approx \pi a^2 d/4$.

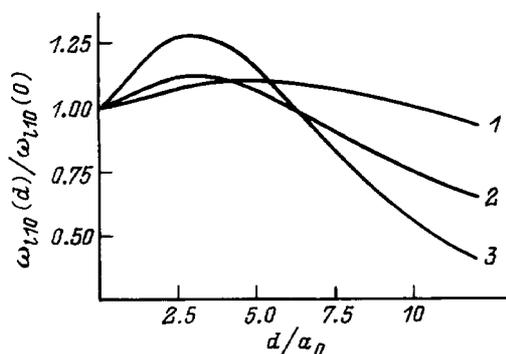


Рис. 1. Зависимость нормированной вероятности переходов между основными уровнями подзон от ширины квантовой ямы при положениях примесного центра: 1 — $z_0 = 0$, 2 — $z_0 = d/4$, 3 — $z_0 = d/2$.

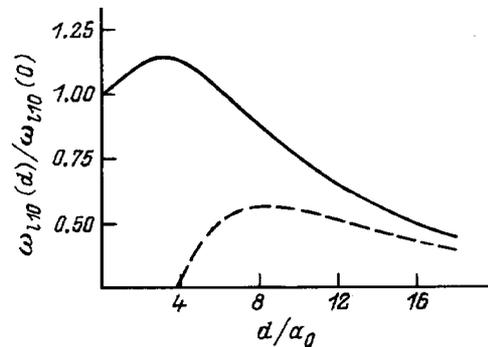


Рис. 2. Зависимость усредненной по положению примесей z_0 нормированной вероятности переходов от ширины квантовой ямы. Штриховой линией показано отношение вероятности переходов для объемного случая (8) к значению $\omega_{l10}(0)$ в двумерном пределе.

На рис. 1 приведены зависимости вероятности переходов от ширины квантовой ямы при различных положениях примесного центра. Усредненная по положению примесей z_0 вероятность переходов (рис. 2) при увеличении ширины квантовой ямы асимптотически приближается к объемному результату (8).

Вклад переходов с изменением номера подзон в скорость рекомбинации можно оценить по вероятности (5) электронных переходов на основной уровень примеси. Как видно из рис. 3, наиболее быстро с шириной d растет вклад переходов с изменением номера подзоны на 1. Полагая, что аналогичная зависимость существует и для переходов на следующие подзоны в валентной зоне, можно считать, что правило отбора по номеру подзоны при излучательных переходах начинает нарушаться, когда d превышает a_0 на порядок и более.

В соответствии с выбранным приближением для волновых функций (13) распределение носителей в примесной зоне необходимо описывать двумерной плотностью состояний. Для расчетов используем невозмущенную

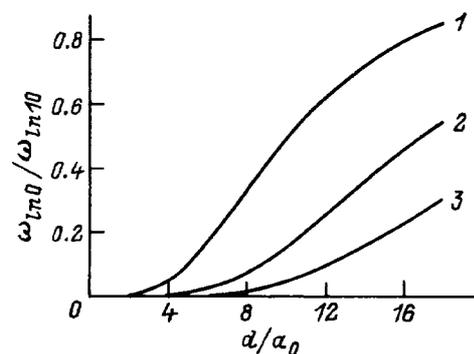


Рис. 3. Зависимость от ширины квантовой ямы отношения вероятности переходов с электронных подзон с номерами: 1 — $n = 2$, 2 — $n = 3$, 3 — $n = 4$ на основной уровень примеси к вероятности переходов между основными уровнями.

плотность состояний

$$\rho_{v1}(E) = \frac{m_v}{\pi \hbar^2} \sum_n H(E_{v0} - E_{vn} - E), \quad (17)$$

где E_{vn} — начальные уровни подзон. Пренебрегая слабой зависимостью вероятности переходов от d и вводя "поверхностную" вероятность оптических переходов без правила отбора $A_1 = (1/2)8\pi a_0^2 A_{cv}$, получаем окончательное выражение для скорости спонтанных переходов с сохранением номера подзоны:

$$r_{sp1}(\hbar\omega) = A_1 \frac{m_c m_v}{\pi^2 \hbar^4} \sum_n \int_{E_{c0}+E_{cn}}^{E_{v0}-E_{vn}+\hbar\omega} H(\hbar\omega - E_{c0} - E_{cn} + E_{v0} - E_{vn}) f_e(E) f_h(E - \hbar\omega) dE. \quad (18)$$

Суммарная скорость рекомбинации составляет

$$R_{sp} = A_1 \sum_n \frac{n_{1n} p_{1n}}{d}, \quad (19)$$

где n_{1n} и p_{1n} — поверхностные концентрации электронов и дырок в подзонах с номером n . Для узких квантовых ям, в которых можно пренебречь заселенностью всех подзон, кроме первых, выражение для скорости рекомбинации упрощается:

$$R_{sp} = A_1 \frac{n_1 p_1}{d}. \quad (20)$$

Таким образом, при постоянных поверхностных концентрациях носителей скорость рекомбинации обратно пропорциональна толщине квантово-размерного слоя.

Такое же по виду выражение, как (20), получается, когда вероятности переходов между любыми подзонами считаются одинаковыми, что применимо к широким квантовым ямам. Однако использование в этом случае постоянного коэффициента A_1 должно приводить, как следует из зависимости вероятности переходов от ширины квантовой ямы (см. рис. 2), к завышению величины скорости рекомбинации.

Результаты расчетов тока инверсии согласно выражениям (12), (19) и (20) приведены на рис. 4. Использование приближения двумерной плотности состояний и модели переходов с сохранением номера подзоны показывает, что для узких квантовых ям ток инверсии практически не зависит от d . Незначительный спад тока инверсии, согласно (19), вызван тем, что с увеличением d число подзон в валентной зоне растет быстрее, чем в зоне проводимости, а учитываются только переходы, которые происходят с сохранением номера подзон. При дальнейшем увеличении d необходимо учитывать также переходы с изменением номера подзон. В этом случае предельно возможное значение тока инверсии, показанное пунктиром, оценивается при помощи выражения (20). В области широких квантовых ям для расчета использовалось приближение объемной плотности состояний в валентной зоне (12). Возрастание тока инверсии с шириной ямы d , как и в модели с выполнением

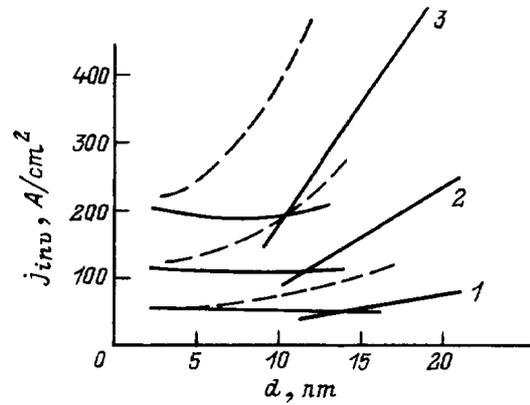


Рис. 4. Зависимости плотности тока инверсии j_{inv} от ширины квантовой ямы d в модели без выполнения правила отбора по волновому вектору, рассчитанные для широких квантовых ям в приближении объемной плотности состояний валентной зоны и для узких квантовых ям в приближении двумерной плотности состояний при переходах с сохранением номера подзон (сплошные линии) и без правила отбора по номеру подзоны (штриховые) для температуры T , К: 1 — 200, 2 — 300, 3 — 400 в системе $Al_{0.3}Ga_{0.7}As-GaAs-Al_{0.3}Ga_{0.7}As$; $m_c = 0.07m_e$, $m_v = 0.40m_e$, $A_{cv} = 1.5 \cdot 10^9 c^{-1}$, $a_0 = 17 \text{ \AA}$.

правила отбора по волновому вектору электрона [7], связано с заселением верхних подзон, которое наиболее существенно при высоких температурах.

Для связи электронной и дырочной концентраций использовалось условие электронейтральности $p_1 - n_1 = 10^{12} \text{ см}^{-3}$. Такой выбор поверхностной концентрации акцепторов требуется для выполнения условия применимости модели без правила отбора, т.е. дырочная концентрация в квантовой яме не должна превышать существенно концентрацию примесей.

Следует заметить, что проведенное рассмотрение излучательных переходов, когда вероятность переходов на состояния в примесной зоне принимается равной вероятности перехода на наиболее сильно локализованные состояния, является упрощенным. Кроме того, в используемой здесь модели водородоподобной примеси не учитываются эффекты экранирования, дисперсия и анизотропия эффективной массы носителей. Поэтому полученные результаты служат лишь для наглядного описания перехода к двумерному пределу при уменьшении ширины квантовой ямы. С математической точки зрения, скорость рекомбинации без выполнения правила отбора согласно (18) по сравнению с моделью прямых переходов находится путем замены δ -образной вероятности переходов $\omega_{n_c k_c, n_v k_c} = A_{cv} \delta_{k_c k_v} \delta_{n_c n_v}$ на значение, одинаковое для любых изменений волнового вектора, т.е. вероятность перехода усредняется по состояниям с разными волновыми векторами в плоскости квантово-размерного слоя. При этом значение вероятности перехода без правила отбора может считаться параметром теории и быть получено из эксперимента.

Настоящая работа частично поддержана Международной программой Дж. Сороса в области точных наук.

Список литературы

- [1] G. Lasher, F. Stern. *Phys. Rev. A*, **133**, 553 (1964).
- [2] В.П. Грибковский. *Теория поглощения и испускания света в полупроводниках* (Минск, Наука и техника, 1975).
- [3] P.T. Landsberg, M.S. Abrahams, M. Osinski. *IEEE J. Quant. Electron.*, **QE-21**, 24 (1985).
- [4] B. Saint-Cricq, F. Lozes-Dupuy, G. Vassiliff. *IEEE J. Quant. Electron.*, **QE-22**, 625 (1986).
- [5] V.K. Kononenko, I.S. Zakharova. *Laser Parameters of Quantum-Well Heterostructures* Preprint/ICTP: IC/91/63 (Trieste, 1991)
- [6] G.W. Taylor. *J. Appl. Phys.*, **70** 2508 (1991).
- [7] В.К. Кононенко. Препринт Ин-та физики АН БССР (Минск, 1987).
- [8] Х. Кейси, М. Паниш. *Лазеры на гетероструктурах* (М., Мир, 1981) т. 1. [Пер. с англ.: Н.С. Casey, М.В. Panish. *Heterostructure Lasers* (N.Y., Academic Press, 1978)].
- [9] G. Bastard. *Phys. Rev. B*, **24**, 4714 (1981).

Редактор Т.А. Полянская

Radiative recombination rate in quantum-well structures in the model with no k-selection rule

A.A. Afonenko, V.K. Kononenko*, I.S. Manak and V.A. Shevtzov

Byelorussian State University,
220080, Minsk, Belarus

* Stepanov Institute of Physics,
Academy of Sciences of Belarus,
220072, Minsk, Belarus

Abstract Influence of dimensional quantization on the probability of optical transitions in quantum-well layers with no \mathbf{k} -selection rule was studied in the work. It has been shown that the inversion current is practically independent on the quantum well layer thickness when the injection efficiency is assumed to be constant. Different approaches for calculation of the spontaneous recombination rate are discussed.

Fax: 375(172) 39-31-31 (Kononenko)

E-mail: ifanbel%bas0.3.basnet.minsk.by@demos.su (Kononenko)