

Оптические свойства гетероструктур с глубокими квантовыми ямами $\text{AlSb/InAs}_{0.84}\text{Sb}_{0.16}/\text{AlSb}$

© Н.В. Павлов[¶], Г.Г. Зебря

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

(Получена 27 декабря 2013 г. Принята к печати 23 января 2014 г.)

В рамках модели Кейна вычислены: энергия уровней размерного квантования, коэффициент поглощения и скорость излучательной рекомбинации для межзонных оптических переходов между различными подзонами размерного квантования в гетероструктуре с глубокой квантовой ямой состава $\text{AlSb/InAs}_{0.86}\text{Sb}_{0.14}/\text{AlSb}$ с учетом и без учета спин-орбитального взаимодействия. Показано, что поправки, вносимые спин-орбитальным взаимодействием при расчете указанных величин, не превышают нескольких десятков процентов даже при значениях константы спин-орбитального взаимодействия, превышающих ширину запрещенной зоны, а учет непараболичности при расчете энергии уровней размерного квантования и коэффициента поглощения является гораздо более важным, чем учет спин-орбитального взаимодействия. При расчете скорости излучательной рекомбинации необходимо учитывать оба эффекта.

1. Введение

В настоящее время одним из перспективных направлений в инфракрасной оптоэлектронике является использование гетероструктур с глубокими квантовыми ямами на основе твердых растворов InAsSb в качестве активной области [1,2]. Эти соединения характеризуются минимальными значениями ширины запрещенной зоны и эффективной массы электронов среди полупроводников $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ [3,4]. Также в этих гетероструктурах интеграл перекрытия между волновыми функциями электронов и тяжелых дырок максимален среди всех подобных структур, благодаря чему процессы излучательной рекомбинации могут протекать с большей скоростью, чем в объемных гетероструктурах [5]. Малая величина запрещенной зоны E_g активной области и большая величина разрыва валентной зоны U_c являются причиной к существенной непараболичности энергетического спектра носителей заряда, что в свою очередь приводит к значительным поправкам к энергии уровней размерного квантования и соответственно к скорости рекомбинации внутри квантовой ямы.

Цель настоящей работы — расчет коэффициента поглощения и скорости излучательной рекомбинации для межзонных оптических переходов между различными подзонами размерного квантования в рамках модели Кейна с учетом и без учета спин-орбитального взаимодействия на примере гетероструктуры состава $\text{AlSb/InAs}_{0.84}\text{Sb}_{0.16}/\text{AlSb}$, которая является одним из перспективных материалов инфракрасной оптоэлектроники [2,6]. Зонная диаграмма исследуемой гетероструктуры представлена на рис. 1.

2. Основные соотношения

Для вычисления коэффициента поглощения для межзонных оптических переходов и скорости излучатель-

ной рекомбинации воспользуемся моделью Кейна, которая наиболее точно описывает волновые функции и энергетический спектр носителей заряда в узкозонных полупроводниках $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ [7,8]. В рамках четырехзонной модели Кейна волновая функция носителей ψ может быть представлена в виде

$$\psi = \Psi_s |s\rangle + \Psi |p\rangle, \quad (1)$$

где Ψ_s и Ψ — спиноры, $|s\rangle$ и $|p\rangle$ — блоховские функции s - и p -типа. Вблизи Γ -точки уравнения для огибающих

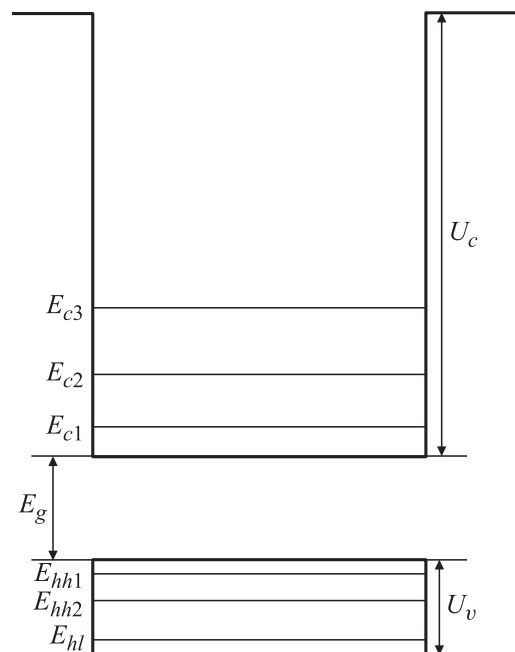


Рис. 1. Зонная диаграмма гетероструктуры с глубокой квантовой ямой $\text{AlSb/InAs}_{0.84}\text{Sb}_{0.16}/\text{AlSb}$ и уровни размерного квантования носителей заряда.

[¶] E-mail: pavlovnv@mail.ru

Ψ_s и Ψ в сферическом приближении имеют вид:

$$(E_c - E)\Psi_s - i\hbar\gamma\nabla\Psi = 0,$$

$$(E_v - \delta - E)\Psi - i\hbar\gamma\nabla\Psi_s + \frac{\hbar^2}{2m_0}(\tilde{\gamma}_1 + 4\tilde{\gamma}_2)\nabla(\nabla\Psi) - \frac{\hbar^2}{2m_0}(\tilde{\gamma}_1 - 2\tilde{\gamma}_2)\nabla \times [\nabla \times \Psi] + i\delta[\sigma \times \Psi] = 0. \quad (2)$$

Здесь E_c и E_v — энергия краев зоны проводимости и валентной зоны, $\delta = \frac{\Delta}{3}$, Δ — константа спин-орбитального расщепления, γ — кейновский матричный элемент размерности скорости, γ_1, γ_2 — обобщенные параметры Латтинжера, $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ — матрицы Паули, m_0 — масса свободного электрона.

Без учета спин-орбитального взаимодействия система кейновских уравнений примет вид:

$$(E_c - E)\Psi_s - i\hbar\gamma\nabla\Psi = 0,$$

$$(E_v - E)\Psi - i\hbar\gamma\nabla\Psi_s + \frac{\hbar^2}{2m_0}(\tilde{\gamma}_1 + 4\tilde{\gamma}_2)\nabla(\nabla\Psi) - \frac{\hbar^2}{2m_0}(\tilde{\gamma}_1 - 2\tilde{\gamma}_2)\nabla \times [\nabla \times \Psi] = 0. \quad (3)$$

2.1. Волновые функции и энергетический спектр носителей заряда в модели Кейна с учетом спин-орбитального взаимодействия

При расчете энергетического спектра электронов и легких дырок мы не будем учитывать члены

$$\frac{\hbar^2}{2m_0}(\tilde{\gamma}_1 + 4\tilde{\gamma}_2)\nabla(\nabla\Psi) \quad \text{и} \quad \frac{\hbar^2}{2m_0}(\tilde{\gamma}_1 - 2\tilde{\gamma}_2)\nabla[\nabla\Psi],$$

так как учет этих членов в (2) и (3) приводит лишь к незначительным погрешностям, поскольку $\frac{m_c}{m_h} \ll 1$, однако существенно упрощает расчеты. Это приводит, в том числе, к тому, что энергетический спектр и волновые функции легких дырок принимают практически тот же вид, что и для электронов. Также будут идентичными граничные условия для электронов и легких дырок. Энергию мы будем отсчитывать от дна зоны проводимости, для легких и тяжелых дырок удобнее пользоваться энергией E' , отсчитываемой вниз от потолка валентной зоны и связанной с E соотношением $E' = -E_g - E$. Ось x мы направляем вдоль направления роста кристалла, ось y — параллельно волновому вектору свободного движения носителей заряда в плоскости квантовой ямы.

Для тяжелых дырок энергетический спектр имеет вид

$$E'_{hh} = \frac{\hbar^2(k_h^2 + q^2)}{2m_h},$$

где $m_h^{-1} = m^{-1}(\tilde{\gamma}_1 - 2\tilde{\gamma}_2)$ — масса тяжелых дырок, E'_{hh}, k_h — энергия и квантованная компонента волнового вектора тяжелых дырок, q — компонента волнового вектора тяжелых дырок в плоскости квантовой ямы.

Волновая функция тяжелых дырок внутри квантовой ямы (т.е. при $|x| < \frac{a}{2}$, где a — ширина квантовой ямы, а x отсчитывается от плоскости симметрии ямы) имеет вид

$$\Psi_h(q, x) = H_1 \begin{pmatrix} q \sin k_n x \eta \\ ik_h \cos k_h x \eta \\ -q \cos k_h x \eta - k_h \sin k_h x \xi \end{pmatrix} + H_2 \begin{pmatrix} q \cos k_n x \xi \\ -ik_h \sin k_h x \xi \\ -k_h \sin k_h x \xi + q \cos k_h x \eta \end{pmatrix}. \quad (5)$$

В области барьера ($x > \frac{a}{2}$) волновые функции выглядят следующим образом:

$$\Psi_h(q, x) = \tilde{H}_1 \begin{pmatrix} q\xi \\ -i\kappa_h \xi \\ -\kappa_h \xi + q\eta \end{pmatrix} e^{-\kappa_h(x - \frac{a}{2})} + \tilde{H}_2 \begin{pmatrix} q\eta \\ -i\kappa_h \eta \\ -q\xi + \kappa_h \eta \end{pmatrix} e^{-\kappa_h(x - \frac{a}{2})}. \quad (6)$$

Здесь

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \eta = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$H_1, H_2, \tilde{H}_1, \tilde{H}_2$ — нормировочные коэффициенты (см. Приложение I), κ_h — модуль волнового вектора тяжелых дырок под барьером. Волновые функции при $x < -\frac{a}{2}$ а можно получить, используя соотношения для компонент симметризованной волновой функции [8].

Энергетический спектр электронов имеет вид

$$\hbar^2\gamma^2(k_c^2 + q^2) = \frac{E_c(E_c^2 + E_c(2E_g + 3\delta) + E_g(E_g + 3\delta))}{E_g + E_c + 2\delta}. \quad (7)$$

Волновая функция электронов внутри квантовой ямы:

$$\Psi_{sc} = A_1 \cos k_c x \eta + A_2 \sin k_c x \xi; \\ \Psi_c = i \frac{\hbar\gamma}{Z} A_1 \begin{pmatrix} k_c \sin k_c x \eta - \lambda_c q \cos k_c x \xi \\ -iq \cos k_c x \eta + i\lambda_c k_c \sin k_c x \xi \\ -\lambda_c k_c \sin k_c x \xi + \lambda_c q \cos k_c x \eta \end{pmatrix} + i \frac{\hbar\gamma}{Z} A_2 \begin{pmatrix} -k_c \cos k_c x \xi - \lambda_c q \sin k_c x \eta \\ -i\lambda_c k_c \cos k_c x \eta - iq \sin k_c x \xi \\ -\lambda_c q \sin k_c x \xi - \lambda_c k_c \cos k_c x \eta \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Волновая функция электронов в области барьера:

$$\begin{aligned} \Psi_{sc} &= [\tilde{A}_1\eta + \tilde{A}_2\xi] e^{-\kappa_c(x-\frac{a}{2})}; \\ \Psi_c &= i \frac{\hbar\tilde{\gamma}}{\tilde{Z}} \tilde{A}_1 \begin{pmatrix} \kappa_c\eta - q\tilde{\lambda}_c\xi \\ -iq\eta + i\kappa_c\tilde{\lambda}_c\xi \\ -\kappa_c\tilde{\lambda}_c\xi + q\tilde{\lambda}_c\eta \end{pmatrix} e^{-\kappa_c(x-\frac{a}{2})} \\ &+ i \frac{\hbar\tilde{\gamma}}{\tilde{Z}} \tilde{A}_2 \begin{pmatrix} -\kappa_c\xi - q\tilde{\lambda}_c\eta \\ -i\kappa_c\tilde{\lambda}_c\eta - iq\xi \\ -q\tilde{\lambda}_c\xi - \kappa_c\tilde{\lambda}_c\eta \end{pmatrix} e^{-\kappa_c(x-\frac{a}{2})}. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь $A_1, A_2, \tilde{A}_1, \tilde{A}_2$ — нормировочные коэффициенты (см. Приложение I),

$$Z = \frac{E_c^2 + E_c(2E_g + 3\delta) + (E_g + 3\delta)E_g}{E_c + E_g + 2\delta},$$

$$\lambda_c = \frac{\delta}{E_c + E_g + 2\delta}, \quad \tilde{\lambda}_c = \frac{\tilde{\delta}}{E_c + U_v + E_g + 2\delta},$$

$$\tilde{Z} = \frac{E^2 + E(2E_g + 2U_v + 3\tilde{\delta}) + (E_g + U_v + 3\tilde{\delta})(E_g + U_v)}{E + E_g + U_v + 2\tilde{\delta}},$$

E_c, k_c — энергия и квантованная компонента волнового вектора электрона внутри ямы, κ_c — модуль волнового вектора электрона в области барьера соответственно, $\tilde{\gamma}$ — кейновский матричный элемент в области барьера, $\tilde{\delta} = \frac{\tilde{\Delta}}{3}$ — константа спин-орбитального расщепления в области барьера, U_v — величина разрыва валентной зоны.

Энергетический спектр легких дырок:

$$\hbar^2\gamma^2(k_l^2 + q^2) = \frac{E'_{lh}(E'_{lh} - E_g)(E'_{lh} - 3\delta)}{E'_{lh} - 2\delta}. \quad (10)$$

Волновая функция легких дырок внутри квантовой ямы:

$$\begin{aligned} \Psi_l &= i \frac{\hbar\gamma}{Z_l} L_1 \begin{pmatrix} k_l \sin k_l x \eta - \lambda_l q \cos k_c x \xi \\ -iq \cos k_l x \eta + i\lambda_l k_l \sin k_l x \xi \\ -\lambda_l k_l \sin k_l x \xi + \lambda_l q \cos k_l x \eta \end{pmatrix} \\ &+ i \frac{\hbar\gamma}{Z_l L_2} \begin{pmatrix} -k_l \cos k_l x \xi - \lambda_l q \sin k_l x \eta \\ -i\lambda_l k_l \cos k_l x \eta - iq \sin k_l x \xi \\ -\lambda_l q \sin k_l x \xi - \lambda_l k_l \cos k_l x \eta \end{pmatrix}; \\ \Psi_{sl} &= [L_1 \cos k_l x \eta + L_2 \sin k_l x \xi]. \end{aligned} \quad (11)$$

Волновая функция легких дырок в области барьера:

$$\begin{aligned} \Psi_l(q, x) &= i \frac{\hbar\tilde{\gamma}}{\tilde{Z}_l} \tilde{L}_1 \begin{pmatrix} \kappa_l \eta - \tilde{\lambda}_l q \xi \\ -iq\eta + i\tilde{\lambda}_l \kappa_l \xi \\ -\tilde{\lambda}_l \kappa_l \xi + \tilde{\lambda}_l q \eta \end{pmatrix} e^{-\kappa_l(x-\frac{a}{2})} \\ &+ i \frac{\hbar\tilde{\gamma}}{\tilde{Z}_l} \tilde{L}_2 \begin{pmatrix} \kappa_l \xi - \tilde{\lambda}_l q \eta \\ -iq\xi + i\tilde{\lambda}_l \kappa_l \eta \\ \tilde{\lambda}_l \kappa_l \eta - \tilde{\lambda}_l q \xi \end{pmatrix} e^{-\kappa_l(x-\frac{a}{2})}, \\ \Psi_{sl} &= [\tilde{L}_1 \xi + \tilde{L}_2 \eta] e^{-\kappa_l(x-\frac{a}{2})}. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь E'_{lh}, k_l — энергия и квантованная компонента волнового вектора легких дырок внутри квантовой ямы, κ_l — модуль волнового вектора легких дырок в области барьера соответственно, $L_1, L_2, \tilde{L}_1, \tilde{L}_2$ — нормировочные коэффициенты (см. Приложение I),

$$Z_l = \frac{(E'_{lh} + 2\delta)(E'_{lh} - \delta)}{E'_{lh} + \delta}, \quad \tilde{Z}_l = \frac{(E'_{lh} - E_g - U_c)(E'_{lh} - 3\delta)}{E'_{lh} - 2\delta},$$

$$\lambda_l = \frac{\delta}{E'_{lh} + E_g + 2\delta}, \quad \tilde{\lambda}_l = \frac{\tilde{\delta}}{E'_{lh} + U_c + E_g + 2\delta}.$$

2.2. Волновые функции и энергетический спектр носителей заряда в модели Кейна без учета спин-орбитального взаимодействия

Если в рамках модели Кейна пренебречь спин-орбитальным взаимодействием, то выражения (4)–(12) существенно упростятся.

Энергетические спектры электронов и легких дырок в этом случае примут вид:

$$E_c = -\frac{E_g}{2} + \sqrt{\frac{E_g^2}{4} + \hbar^2\gamma^2(k_c^2 + q^2)}, \quad (13)$$

$$E'_{lh} = -\frac{E_g}{2} + \sqrt{\frac{E_g^2}{4} + \hbar^2\gamma^2(k_l^2 + q^2)}. \quad (14)$$

Спектр тяжелых дырок будет таким же, как и в случае учета спин-орбитального взаимодействия.

Волновая функция тяжелых дырок внутри квантовой ямы:

$$\Psi_h(q, x) = H_1 \begin{pmatrix} q \sin k_h x \\ ik_h \cos k_h x \\ 0 \end{pmatrix} + H_2 \begin{pmatrix} q \cos k_h x \\ -ik_h \sin k_h x \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (15)$$

В области барьера:

$$\Psi_h(q, x) = \tilde{H}_1 \begin{pmatrix} q \\ -i\kappa_h \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\kappa_h(x-\frac{a}{2})} + \tilde{H}_2 \begin{pmatrix} q \\ -i\kappa_h \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\kappa_h(x-\frac{a}{2})}. \quad (16)$$

Волновая функция электронов внутри квантовой ямы имеет вид:

$$\begin{aligned} \Psi_{sc} &= A_1 \cos k_c x + A_2 \sin k_c x, \\ \Psi_c &= \frac{\hbar\gamma}{E_c + E_g} A_1 \begin{pmatrix} k_c \sin k_c x \\ -iq \cos k_c x \\ 0 \end{pmatrix} \\ &+ i \frac{\hbar\gamma}{E_c + E_g} A_2 \begin{pmatrix} -k_c \cos k_c x \\ -iq \sin k_c x \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (17)$$

Волновая функция электронов в области барьера:

$$\begin{aligned} \Psi_{sc} &= [\tilde{A}_1 + \tilde{A}_2] e^{-\kappa_c(x-\frac{a}{2})}, \\ \Psi_c &= i \frac{\hbar\tilde{\gamma}}{E_c + E_g + U_v} \tilde{A}_1 \begin{pmatrix} \kappa_c \\ -iq \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\kappa_c(x-\frac{a}{2})} \\ &+ i \frac{\hbar\tilde{\gamma}}{E_c + E_g + U_v} \tilde{A}_2 \begin{pmatrix} -\kappa_c \\ -iq \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\kappa_c(x-\frac{a}{2})}. \end{aligned} \quad (18)$$

Волновая функция легких дырок внутри квантовой ямы имеет вид:

$$\begin{aligned} \Psi_{sc} &= L_1 \cos k_l x + L_2 \sin k_l x, \\ \Psi_c &= i \frac{\hbar\gamma}{E'_{lh} + E_g} L_1 \begin{pmatrix} k_l \sin k_l x \\ -iq \cos k_l x \\ 0 \end{pmatrix} \\ &+ i \frac{\hbar\gamma}{E'_{lh} + E_g} L_2 \begin{pmatrix} -k_l \cos k_l x \\ -iq \sin k_l x \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (19)$$

Волновая функция электронов в области барьера:

$$\begin{aligned} \Psi_{sc} &= [\tilde{L}_1 + \tilde{L}_2] e^{-\kappa_l(x-\frac{a}{2})}, \\ \Psi_c &= i \frac{\hbar\tilde{\gamma}}{E'_{lh} + E_g + U_c} \tilde{L}_1 \begin{pmatrix} \kappa_l \\ -iq \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\kappa_l(x-\frac{a}{2})} \\ &+ i \frac{\hbar\tilde{\gamma}}{E'_{lh} + E_g + U_c} \tilde{L}_2 \begin{pmatrix} -\kappa_l \\ -iq \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\kappa_l(x-\frac{a}{2})}. \end{aligned} \quad (20)$$

3. Уровни энергии носителей заряда

Положение уровней размерного квантования и значенные квантованной компоненты волнового вектора могут быть вычислены из дисперсионных уравнений. Дисперсионные уравнения выводятся из граничных условий,

а именно: для электронов и легких дырок — непрерывности s - и x -компонент волновых функций на гетерогранице, для тяжелых дырок — непрерывности Ψ_x и производной $\frac{d\Psi_x}{dx}$. Следует особо отметить, что при расчете положения уровней размерного квантования, в отличие от работы [8], где используется параболическое приближение для спектра электронов

$$E_c = \frac{\hbar^2 (k_c^2 + q^2)}{2m_c},$$

мы будем пользоваться выражением (8). Учет непараболичности оказывает существенное влияние на положение уровней размерного квантования, что будет показано далее.

Спектр тяжелых дырок разделяется на четные и нечетные состояния, определяемые уравнениями:

$$\operatorname{tg} \frac{k_h a}{2} = \frac{\kappa_h}{k_h} \quad (21a)$$

для четных уровней,

$$\operatorname{ctg} \frac{k_h a}{2} = \frac{-k_h}{\kappa_h} \quad (21b)$$

для нечетных уровней.

Для электронов дисперсионное уравнение имеет вид

$$\begin{aligned} &\left(k_c \operatorname{tg} \frac{k_c a}{2} - \frac{Z\tilde{\gamma}}{\tilde{Z}\gamma} \kappa_c \right) \left(k_c \operatorname{ctg} \frac{k_c a}{2} + \frac{Z\tilde{\gamma}}{\tilde{Z}\gamma} \kappa_c \right) \\ &= -q^2 \left(\lambda_c - \tilde{\lambda}_c \frac{Z\tilde{\gamma}}{\tilde{Z}\gamma} \right)^2. \end{aligned} \quad (22)$$

При $q \ll k_c$ спектр электронов также расщепляется на четные и нечетные состояния, определяемые уравнениями:

$$k_c \operatorname{tg} \frac{k_c a}{2} - \frac{Z\tilde{\gamma}}{\tilde{Z}\gamma} \kappa_c = 0 \quad (23a)$$

для четных уровней,

$$k_c \operatorname{ctg} \frac{k_c a}{2} + \frac{Z\tilde{\gamma}}{\tilde{Z}\gamma} \kappa_c = 0 \quad (23b)$$

для нечетных уровней.

Дисперсионное уравнение для легких дырок имеет вид

$$\begin{aligned} &\left(k_l \operatorname{tg} \frac{k_l a}{2} - \frac{Z_l\tilde{\gamma}}{\tilde{Z}_l\gamma} \kappa_l \right) \left(k_l \operatorname{ctg} \frac{k_l a}{2} + \frac{Z_l\tilde{\gamma}}{\tilde{Z}_l\gamma} \kappa_l \right) \\ &= -q^2 \left(\lambda_l - \tilde{\lambda}_l \frac{Z_l\tilde{\gamma}}{\tilde{Z}_l\gamma} \right)^2. \end{aligned} \quad (24)$$

При $q \ll k_l$ спектр легких дырок выглядит следующим образом:

$$k_l \operatorname{tg} \frac{k_l a}{2} - \frac{Z_l\tilde{\gamma}}{\tilde{Z}_l\gamma} \kappa_l = 0 \quad (25a)$$

для четных уровней,

$$k_l \operatorname{ctg} \frac{k_l a}{2} + \frac{Z_l\tilde{\gamma}}{\tilde{Z}_l\gamma} \kappa_l = 0 \quad (25b)$$

для нечетных уровней.

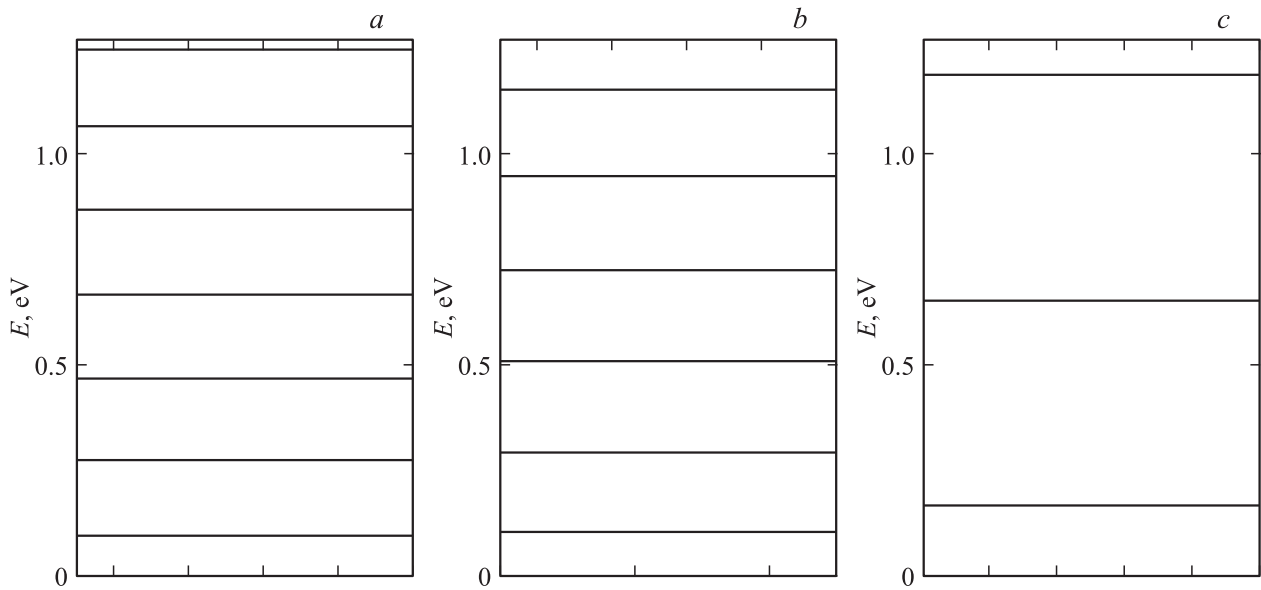


Рис. 2. *a* — расположение уровней размерного квантования в зоне проводимости при ширине квантовой ямы $a = 100 \text{ \AA}$, рассчитанное в рамках модели Кейна без учета спин-орбитального взаимодействия. *b* — расположение уровней размерного квантования в зоне проводимости при ширине квантовой ямы $a = 100 \text{ \AA}$, рассчитанное в рамках модели Кейна с учетом спин-орбитального взаимодействия. *c* — расположение уровней размерного квантования в зоне проводимости при ширине квантовой ямы $a = 100 \text{ \AA}$, рассчитанное без учета непараболичности энергетического спектра носителей.

Без учета спин-орбитального взаимодействия дисперсионные уравнения для электронов и легких дырок в приближении $q \ll k_c, k_l$ имеют следующий вид:
 электроны:

$$k_c \operatorname{tg} \frac{k_c a}{2} - \frac{\tilde{\gamma}(E_c + E_g)}{\gamma(E_c + E_g + U_v)} \kappa_c = 0 \quad (26a)$$

для четных уровней,

$$k_c \operatorname{ctg} \frac{k_c a}{2} + \frac{\tilde{\gamma}(E_c + E_g)}{\gamma(E_c + E_g + U_v)} \kappa_c = 0 \quad (26b)$$

для нечетных уровней;

легкие дырки:

$$k_l \operatorname{tg} \frac{k_l a}{2} - \frac{\tilde{\gamma}(E'_{lh} + E_g)}{\gamma(E'_{lh} + E_g + U_c)} \kappa_l = 0 \quad (27a)$$

для четных уровней,

$$k_l \operatorname{ctg} \frac{k_l a}{2} + \frac{\tilde{\gamma}(E'_{lh} + E_g)}{\gamma(E'_{lh} + E_g + U_c)} \kappa_l = 0 \quad (27b)$$

для нечетных уровней.

Для тяжелых дырок дисперсионные соотношения без учета спин-орбитального взаимодействия совпадают с выражениями (21a–21b).

Подставляя в дисперсионные соотношения волновые вектора, вычисленные из выражений энергетических спектров носителей, с помощью численного расчета можно получить значения уровней энергии носителей заряда. На рис. 2, *a–c* показаны уровни энергии электронов в зоне проводимости при ширине квантовой

ямы $a = 100 \text{ \AA}$ без учета спин-орбитального взаимодействия (рис. 2, *a*) и с учетом спин-орбитального взаимодействия (рис. 2, *b*). Из рисунков видно, что учет спин-орбитального взаимодействия не приводит к существенному изменению значения энергий уровней размерного квантования электронов, несмотря на то, что

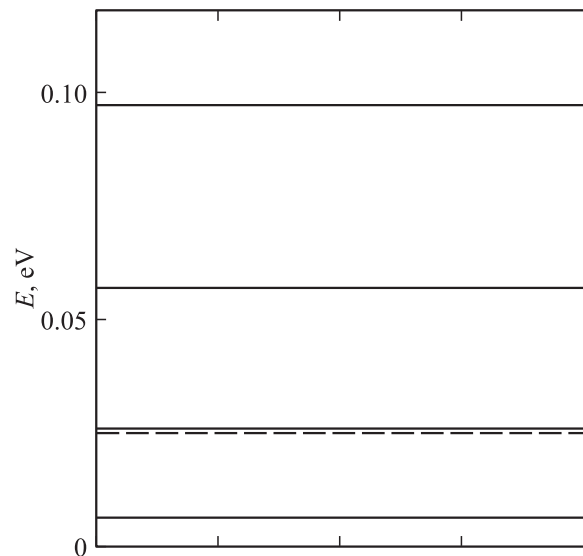


Рис. 3. Расположение уровней размерного квантования в валентной зоне при ширине квантовой ямы $a = 100 \text{ \AA}$, рассчитанное в рамках модели Кейна без учета спин-орбитального взаимодействия. Уровни тяжелых дырок обозначены сплошными линиями, уровень легких дырок — прерывистой.

Таблица 1. Значение энергии и квантованной компоненты волнового вектора для различных уровней размерного квантования в гетероструктуре с глубокой квантовой ямой AlSb/InAs_{0.84}Sb_{0.16}/AlSb

Уровень размерного квантования	Без учета спин-орбитального взаимодействия		С учетом спин-орбитального взаимодействия	
	Энергия уровня E , эВ	Квантованная компонента волнового вектора k , 10^6 см^{-1}	Энергия уровня E , эВ	Квантованная компонента волнового вектора k , 10^6 см^{-1}
$c1$	0.095	2.5	0.101	2.56
$c2$	0.272	5.22	0.293	5.32
$c3$	0.467	8.03	0.509	8.18
$hh1$	0.006	2.66	0.006	2.66
$hh2$	0.026	5.3	0.026	5.3
$hh3$	0.057	7.88	0.057	7.88
$lh1$	0.025	1.26	0.027	1.19

$\Delta_{so} \approx 1.6E_g$. Следует особо отметить тот факт, что учет непараболичности в рамках модели Кейна существенно сказывается на положении уровней размерного квантования и даже на их числе. Так, при $a = 100 \text{ \AA}$ в исследуемой гетероструктуре при параболическом спектре электронов получается три уровня размерного квантования в зоне проводимости [9] (рис. 2, c), с учетом непараболичности, но без учета спин-орбитального взаимодействия — семь уровней, с учетом непараболичности и спин-орбитального взаимодействия — шесть уровней. Таким образом, учет непараболичности является весьма существенным при расчете энергии уровней размерного квантования в зоне проводимости.

На рис. 3 показано расположение уровней размерного квантования в валентной зоне при ширине квантовой ямы $a = 100 \text{ \AA}$ без учета спин-орбитального взаимодействия. Стоит отметить тот факт, что основной подуровень легких дырок практически совпадает с первым возбужденным подуровнем тяжелых дырок. Учет спин-орбитального взаимодействия приведет лишь к тому, что уровень легких дырок сместится вверх на 2 мэВ.

Значения энергии наиболее важных уровней размерного квантования и соответствующие значения волнового вектора приведены в табл. 1.

4. Расчет зависимости коэффициента поглощения от частоты оптического перехода

Вычислим теперь коэффициенты поглощения $\alpha_{ij}(\omega)$ для различных межзонных оптических переходов в глубокой квантовой яме. В [10] получено общее выражение зависимости коэффициента межзонного поглощения от частоты перехода:

$$\alpha(\omega) = \sum_{i,j} \frac{4\pi e^2}{\sqrt{\kappa_0}} \frac{1}{\hbar c} \frac{1}{a\hbar\omega} \times \int q dq |P_{ij}|^2 \delta(E_i(q) - E_j(q) - \hbar\omega), \quad (28)$$

где индекс i относится к различным подзонам в зоне проводимости, а индекс j — валентной зоны. Здесь κ_0 — статическая диэлектрическая проницаемость, $|P_{ij}|^2 = 2|P_{ij}^x|^2 + |P_{ij}^{\parallel}|^2$, а величина

$$P_{ij} = i\hbar\gamma S \int (\bar{\Psi}_i \Psi_j + \Psi_j \bar{\Psi}_i) dx, \quad (29)$$

где S — нормировочная площадь. Отметим, что при подстановке в выражение (28) E'_j вместо E_j в качестве аргумента δ -функции мы получим величину $E_i(q) + E_g + E'_j(q) - \hbar\omega$.

Таким образом, задача нахождения коэффициента поглощения сводится к задаче нахождения величины $|P_{ij}|^2$. Данная величина может быть легко найдена, используя приведенные выше волновые функции носителей заряда. Результаты расчетов приведены в *Приложении II*.

Произведем оценку величины $|P_{ij}|^2$. При совпадающей четности волновых функций начального и конечного состояния матричный элемент перехода пропорционален k_{hj}^2 , при различной q^2 . Если подставлять в выражения для $|P_{ij}|^2$ вместо q значение волнового вектора теплового движения электронов $q_T = \frac{\sqrt{2k_B T m_c}}{\hbar}$, где T — абсолютная температура, то отношение $\frac{q_T^2}{k_{hj}^2} \approx 0.2$ (здесь и далее расчеты проводятся для $T = 300 \text{ К}$). Таким образом, при комнатной температуре для тепловых значений q значения коэффициента поглощения для переходов, у которых $|P_{ij}|^2 \propto k_{hj}^2$ будут больше, чем у переходов, у которых $|P_{ij}|^2 \propto q^2$.

Величины MI^2 и MII^2 , где

$$MI_{ij} = \frac{\sin(k_i + k_j) \frac{a}{2}}{k_i + k_j} + \frac{\sin(k_i - k_j) \frac{a}{2}}{k_i - k_j},$$

$$MII_{ij} = \frac{\sin(k_i + k_j) \frac{a}{2}}{k_i + k_j} - \frac{\sin(k_i - k_j) \frac{a}{2}}{k_i - k_j},$$

пропорциональны интегралу перекрытия волновых функций. Значения величин MI^2 и MII^2 представлены в табл. 2. Следует отметить аномально малое значение величины MI_{c3hh1}^2 , что приводит к тому, что коэффициент

Таблица 2. Значение величин MI^2 и MII^2 для различных оптических переходов

Переход	Без учета спин-орбитального взаимодействия		С учетом спин-орбитального взаимодействия	
	$MI_{ij}^2, \text{см}^2$	$MII_{ij}^2, \text{см}^2$	$MI_{ij}^2, \text{см}^2$	$MII_{ij}^2, \text{см}^2$
$c1-hh1$	$3.6 \cdot 10^{-13}$		$3.5 \cdot 10^{-13}$	
$c2-hh1$		$2.1 \cdot 10^{-13}$		$2.1 \cdot 10^{-13}$
$c3-hh1$	$4.4 \cdot 10^{-17}$		$2.6 \cdot 10^{-18}$	
$c1-hh2$		$6.9 \cdot 10^{-14}$		$7.1 \cdot 10^{-14}$
$c2-hh2$	$3.3 \cdot 10^{-13}$		$3.3 \cdot 10^{-13}$	
$c1-lh1$	$5.2 \cdot 10^{-13}$	$4.6 \cdot 10^{-14}$	$5 \cdot 10^{-13}$	$4.7 \cdot 10^{-14}$
$c2-lh1$	$4.6 \cdot 10^{-14}$	$6 \cdot 10^{-14}$	$3.9 \cdot 10^{-14}$	$5.9 \cdot 10^{-14}$

поглощения для данного перехода будет на несколько порядков меньше, чем для остальных рассматриваемых переходов, а время излучательной рекомбинации — на несколько порядков больше.

Произведения остальных сомножителей в выражении для $|P_{ij}|^2$ имеют сложную зависимость от частоты, однако для области частот, соответствующей рассматриваемым переходам, их величины близки друг к другу.

Таким образом, максимальное значение $|P_{ij}|^2$ будет для перехода $c2-hh2$.

Интеграл в выражении (28) можно легко вычислить, используя свойства δ -функции. Таким образом, получаем для коэффициента поглощения:

$$\alpha(\omega)_{ij} = \frac{2\pi}{\sqrt{\kappa_0}} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{1}{a\hbar\omega} |P_{ij}|_{E_i=\hbar\omega-E_g-E'}^2 \times \left(\frac{dq^2(E_i)}{dE_i} \right)_{E_i=\hbar\omega-E_g-E'}, \quad (30)$$

где производная $\frac{dq^2(E_i)}{dE_i}$ равна без учета спин-орбитального взаимодействия:

$$\frac{dq^2(E_i)}{dE_i} = \frac{2E_i + E_g}{\hbar^2\gamma^2}, \quad (31a)$$

с учетом спин-орбитального взаимодействия:

$$\frac{dq^2(E_i)}{dE_i} = \frac{1}{\hbar^2\gamma^2} \left(2E_i + E_g + \delta - \frac{2\delta^2(E_g + 2\delta)}{(E_i + E_g + 2\delta)^2} \right). \quad (31b)$$

Выражения (31a–31b), полученные дифференцированием соотношений (13) и (7) соответственно, заметно отличаются от аналогичного выражения для параболического приближения

$$\frac{dq^2(E_i)}{dE_i} = \frac{2m_c}{\hbar^2},$$

что приводит к существенному увеличению коэффициента поглощения по сравнению с параболическим приближением (для перехода $c1-hh1$ увеличение происходит примерно в 2 раза). Это происходит вследствие того, что величина $\frac{dq^2(E_i)}{dE_i}$ пропорциональна плотности состояний в зоне проводимости.

Графики зависимостей коэффициента поглощения от частоты оптического перехода представлены на рис. 4, *a* и *b*. Отметим тот факт, что с учетом спин-орбитального взаимодействия увеличивается значение коэффициента поглощения для переходов между уровнями с совпадающей четностью и уменьшается — для переходов между уровнями с различной четностью, хотя и в том, и в другом случае отличие составляет порядка 10% (кроме перехода $c3-hh1$, для которого при учете спин-орбитального взаимодействия значение коэффициента поглощения уменьшается на порядок).

Таким образом можно сделать вывод, что при расчете коэффициента поглощения учет непараболичности энергетического спектра электронов является гораздо более важным, чем учет спин-орбитального взаимодействия.

5. Скорость излучательной рекомбинации

Скорость излучательной рекомбинации вычисляется согласно выражению [10]:

$$R_{ph} = \frac{4\kappa_\infty}{\pi\sqrt{\kappa_0}} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{1}{\hbar^3 c^2} \times \sum_{i,j} \int dq dq |P_{ij}|^2 f_i(q) f_j(q) (E_i(q) + E'_j(q) + E_g), \quad (32)$$

где κ_∞ — высокочастотная диэлектрическая проницаемость, f_c, f_h — функции распределения электронов и тяжелых дырок. Здесь мы учли, что $E' = -E_g - E$.

В случае невырожденных носителей интеграл в выражении (32) можно упростить, если считать, что характерное значение q равно q_T , тогда множители $|P_{ij}(q_T)|^2$ и $E_i(q_T) + E'_j(q_T) + E_g$ можно вынести за знак интеграла, а интеграл

$$\int dq dq f_c(q) f_h(q) = \pi \frac{n_i p \exp\left(\frac{-\epsilon_j}{k_B T}\right)}{N_v},$$

где $N_v = \frac{m_h k_B T}{\pi \hbar^2}$ — эффективная плотность состояний в валентной зоне, n, p — двумерные концентрации электронов и дырок, ϵ_j — расстояние между j -м подуровнем

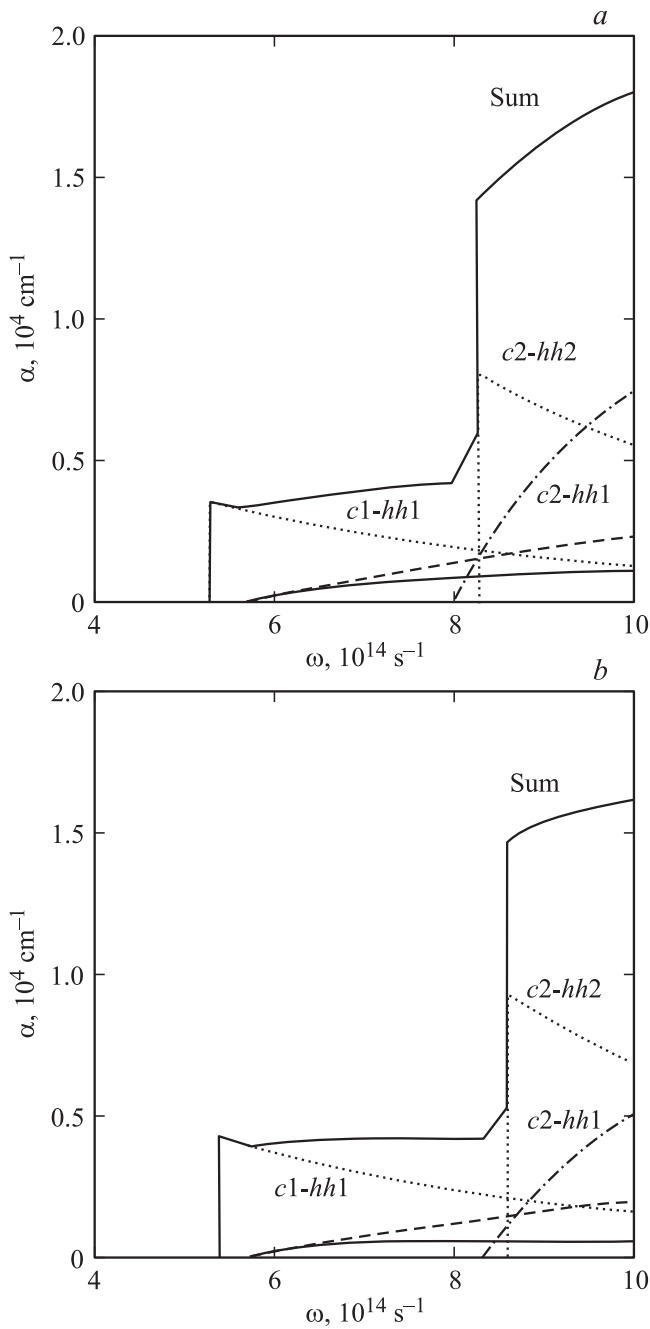


Рис. 4. *a* — зависимость коэффициента поглощения от частоты оптического перехода при ширине квантовой ямы $a = 100 \text{ \AA}$, рассчитанная в рамках модели Кейна без учета спин-орбитального взаимодействия. На рисунке показаны зависимости суммарного коэффициента поглощения от частоты оптического перехода, а также переходов, вносящих наибольший вклад в суммарный коэффициент поглощения. *b* — зависимость коэффициента поглощения от частоты оптического перехода при ширине квантовой ямы $a = 100 \text{ \AA}$, рассчитанная в рамках модели Кейна с учетом спин-орбитального взаимодействия. На рисунке показаны зависимости суммарного коэффициента поглощения от частоты оптического перехода, а также переходов, вносящих наибольший вклад в суммарный коэффициент поглощения.

и основным подуровнем тяжелых дырок. В итоге получаем следующее выражение для скорости излучательной рекомбинации:

$$R_{\text{ph}} = \frac{4\kappa_{\infty}}{\sqrt{\kappa_0}} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{1}{\hbar^3 c^2} \times \sum_{i,j} |P_{ij}(q_T)|^2 (E_i(q_T) + E'_j(q_T) + E_g) \frac{n_i p \exp(\frac{-\epsilon_j}{k_B T})}{N_v} \quad (33)$$

В случае, когда электроны вырождены, в формулу (33) вместо q_T нужно подставить q_F (где q_F — волновой вектор, соответствующий энергии Ферми).

Для невырожденных носителей время излучательной рекомбинации для каждого отдельного перехода равно:

$$\tau_{phij} = \frac{n_i}{R_{ij}} = \frac{\sqrt{\kappa_0}}{4\pi\kappa_{\infty}} \frac{\hbar c}{e^2} \frac{\hbar c^2 m_h k_B T \exp(\frac{\epsilon_j}{k_B T})}{p |P_{ij}(q_T)|^2 (E_i(q_T) + E'_j(q_T) + E_g)} \quad (34)$$

Значения времени излучательной рекомбинации для различных переходов при концентрации дырок, равной $p = 10^{12} \text{ см}^{-2}$ приведены в табл. 3.

Отметим, что время излучательной рекомбинации носителей заряда, аналогично коэффициенту поглощения, оказывается меньше у оптических переходов, для которых $|P_{ij}^{\parallel}|^2 \propto k_{ij}^2$, чем у переходов, для которых $|P_{ij}^{\parallel}|^2 \propto q^2$. Также следует отметить, что время излучательной рекомбинации с учетом спин-орбитального взаимодействия оказывается несколько меньше для переходов между уровнями одной четности и для переходов с участием легких дырок, и больше для переходов между уровнями различной четности. Исключение составляет переход $c3-hh1$, для которого величина MI^2 оказывается на порядок меньше, чем аналогичная величина для модели без спин-орбитального взаимодействия, вследствие чего соответствующий переход оказывается существенно более медленным.

Таблица 3. Время излучательной рекомбинации для различных оптических переходов

Переход	Без учета спин-орбитального взаимодействия	С учетом спин-орбитального взаимодействия
	$\tau_{ij}, \text{ c}^{-1}$	$\tau_{ij}, \text{ c}^{-1}$
$c1-hh1$	$1.5 \cdot 10^{-8}$	$1.2 \cdot 10^{-8}$
$c2-hh1$	$1.9 \cdot 10^{-8}$	$2 \cdot 10^{-8}$
$c3-hh1$	$8 \cdot 10^{-5}$	$1.003 \cdot 10^{-4}$
$c1-hh2$	$2 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^{-7}$
$c2-hh2$	$1.2 \cdot 10^{-8}$	$1.01 \cdot 10^{-8}$
$c1-lh1$	$1.02 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-7}$
$c2-lh1$	$1.1 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-6}$

Непараболичность энергетического спектра электронов влияет на скорость излучательной рекомбинации прежде всего за счет уменьшения энергии уровней размерного квантования электронов и следовательно множителя $E_i(q_T) + E_j'(q_T) + E_g$, что приводит к увеличению времени излучательной рекомбинации. Величина поправок, вносимых непараболичностью энергетического спектра электронов, сопоставима с величиной поправок, вносимых спин-орбитальным взаимодействием, поэтому для расчета времени излучательной рекомбинации необходимо учитывать обе поправки.

6. Заключение

В данной работе была исследована гетероструктура с квантовой ямой состава $\text{AlSb/InAs}_{0.84}\text{Sb}_{0.16}/\text{AlSb}$ с учетом непараболичности в рамках модели Кейна без учета и с учетом спин-орбитального взаимодействия. Были рассчитаны значения энергии уровней размерного квантования носителей заряда и соответствующие значения квантованных компонент волновых векторов в зоне проводимости и в валентной зоне для ширины квантовой ямы $a = 100 \text{ \AA}$. Показано, что несмотря на большое значение константы спин-орбитального отщепления $\Delta_{so} \approx 1.6E_g$, учет спин-орбитального взаимодействия слабо сказывается на положении уровней размерного квантования, в противовес существенной роли учета непараболичности. Например, при ширине квантовой ямы $a = 100 \text{ \AA}$ число энергетических уровней размерного квантования в рамках параболического приближения равно трем [9], в рамках модели Кейна без учета спин-орбитального взаимодействия — шести. Таким образом, учет непараболичности при расчете энергии уровней размерного квантования играет существенную роль и является более важным, чем учет спин-орбитального взаимодействия.

В работе рассчитаны значения матричных элементов для межзонных оптических переходов между различными подзонами размерного квантования и зависимости соответствующих этим переходам коэффициентов поглощения от частоты. Показано, что учет непараболичности энергетического спектра электронов приводит к существенному увеличению коэффициента поглощения за счет увеличения значений функции плотности состояний. Также показано, что учет спин-орбитального взаимодействия приводит к незначительному увеличению значения коэффициента поглощения для переходов между уровнями одной четности и к уменьшению — для переходов между уровнями различной четности. Таким образом, учет непараболичности при расчете коэффициента поглощения является более важным, чем учет спин-орбитального взаимодействия.

Также рассчитана скорость излучательной рекомбинации для различных межзонных оптических переходов для случая невырожденных электронов. Показано,

что учет спин-орбитального взаимодействия приводит к уменьшению времени переходов между уровнями одной четности (кроме перехода $c3-hh1$), а также переходов с участием легких дырок, и к увеличению — для переходов между уровнями различной четности. Минимальное время получено для перехода $c2-hh2$ и составляет $\tau_{ph\ c2hh2} = 1.2 \cdot 10^{-8} \text{ с}$ без учета спин-орбитального взаимодействия и $\tau_{ph\ c2hh2} = 1.01 \cdot 10^{-8} \text{ с}$ с его учетом. Показано, что учет непараболичности приводит к увеличению времени излучательной рекомбинации, причем поправки, вносимые непараболичностью и спин-орбитальным взаимодействием, сопоставимы по величине, поэтому при расчете времени излучательной рекомбинации необходимо учитывать оба эффекта.

В дальнейшем планируется для данной гетероструктуры изучить различные процессы, такие как: оже-рекомбинация, ударная ионизация, электрон-электронное и электрон-фононное взаимодействие, и найти поправки, обусловленные учетом непараболичности энергетического спектра носителей заряда и спин-орбитальным взаимодействием для более точного расчета характеристик оптоэлектронных приборов на основе гетероструктур с глубокими квантовыми ямами.

Приложение I

Нормировочные коэффициенты

Из условия нормировки $\int \bar{\Psi}\Psi d^3r = 1$ можно получить следующие выражения нормировочных коэффициентов (принимая нормировочную площадь равной единице):

С учетом спин-орбитального взаимодействия:

$$\frac{1}{A_1^2} = \frac{a}{2} + \frac{\sin k_c a}{2k_c} + \frac{\hbar^2 \gamma^2}{Z^2} (1 + 2\lambda_c^2) \times \left((k_c^2 + q^2) \frac{a}{2} - (k_c^2 - q^2) \frac{\sin k_c a}{2k_c} \right) + \frac{\cos^2 \frac{k_c a}{2}}{\kappa_c} \left(1 + \frac{\hbar^2 \tilde{\gamma}^2}{Z} (\kappa_c^2 + q^2) (1 + 2\tilde{\lambda}_c^2) \right),$$

$$\frac{1}{A_2^2} = \frac{a}{2} - \frac{\sin k_c a}{2k_c} + \frac{\hbar^2 \gamma^2}{Z^2} (1 + 2\lambda_c^2) \times \left((k_c^2 + q^2) \frac{a}{2} + (k_c^2 - q^2) \frac{\sin k_c a}{2k_c} \right) + \frac{\sin^2 \frac{k_c a}{2}}{\kappa_c} \left(1 + \frac{\hbar^2 \tilde{\gamma}^2}{Z} (\kappa_c^2 + q^2) (1 + 2\tilde{\lambda}_c^2) \right),$$

$$\frac{1}{H_1^2} = a (k_h^2 + q^2) + \frac{\sin k_h a}{k_h} (k_h^2 - q^2) + \frac{2 \sin^2 \frac{k_c a}{2}}{\kappa_c} (\kappa_c^2 + q^2),$$

Приложение II

$$\frac{1}{H_2^2} = a(k_h^2 + q^2) - \frac{\sin k_h a}{k_h}(k_h^2 - q^2) + \frac{2 \cos^2 \frac{k_c a}{2}}{\kappa_c}(\kappa_c^2 + q^2),$$

$$\frac{1}{L_1^2} = \frac{a}{2} + \frac{\sin k_l a}{2k_l} + \frac{\hbar^2 \gamma^2}{Z_l^2} (1 + 2\lambda_l^2) \times \left((k_l^2 + q^2) \frac{a}{2} - (k_l^2 - q^2) \frac{\sin k_l a}{2k_l} \right) + \frac{\cos^2 \frac{k_l a}{2}}{\kappa_l} \left(1 + \frac{\hbar^2 \tilde{\gamma}^2}{\tilde{Z}_l} (\kappa_l^2 + q^2) (1 + 2\tilde{\lambda}_l^2) \right).$$

(II, I, 1)

Без учета спин-орбитального взаимодействия:

$$\frac{1}{A_1^2} = \frac{a}{2} + \frac{\sin k_c a}{2k_c} + \frac{\hbar^2 \gamma^2}{(E_c + E_g)^2} \times \left((k_c^2 + q^2) \frac{a}{2} - (k_c^2 - q^2) \frac{\sin k_c a}{2k_c} \right) + \frac{\cos^2 \frac{k_c a}{2}}{\kappa_c} \left(1 + \hbar^2 \tilde{\gamma}^2 (\kappa_c^2 + q^2) (1 + 2\tilde{\lambda}_c^2) \right),$$

$$\frac{1}{A_2^2} = \frac{a}{2} - \frac{\sin k_c a}{2k_c} + \frac{\hbar^2 \gamma^2}{(E_c + E_g)^2} \times \left((k_c^2 + q^2) \frac{a}{2} + (k_c^2 - q^2) \frac{\sin k_c a}{2k_c} \right) + \frac{\sin^2 \frac{k_c a}{2}}{\kappa_c} \left(1 + \frac{\hbar^2 \tilde{\gamma}^2}{(E_c + E_g + U_v)^2} (\kappa_c^2 + q^2) \right),$$

$$\frac{1}{H_1^2} = \frac{a}{2} (k_h^2 + q^2) + \frac{\sin k_h a}{2k_h} (k_h^2 - q^2) + \frac{\sin^2 \frac{k_c a}{2}}{\kappa_c} (\kappa_c^2 + q^2),$$

$$\frac{1}{H_2^2} = \frac{a}{2} (k_h^2 + q^2) - \frac{\sin k_h a}{2k_h} (k_h^2 - q^2) + \frac{\cos^2 \frac{k_c a}{2}}{\kappa_c} (\kappa_c^2 + q^2),$$

$$\frac{1}{L_2^2} = \frac{a}{2} + \frac{\sin k_l a}{2k_l} + \frac{\hbar^2 \gamma^2}{(E_{lh} + E_g)^2} \times \left((k_l^2 + q^2) \frac{a}{2} - (k_l^2 - q^2) \frac{\sin k_l a}{2k_l} \right) + \frac{\cos^2 \frac{k_l a}{2}}{\kappa_l} \left(1 + \frac{\hbar^2 \tilde{\gamma}^2}{(E_{lh} + E_g + U_c)^2} (\kappa_l^2 + q^2) \right).$$

(II, I, 2)

Вычисление величины $|P_{ij}|^2$

Вычислим величину $|P_{ij}|^2$ для переходов между различными энергетическими состояниями зоны проводимости и валентной зоны. В выражении (29) можно ограничиться интегрированием по области $|x| < \frac{a}{2}$, так как $U_c \gg E_c$ и проникновение волновых функций носителей под барьер мало. В итоге, используя приведенные выше волновые функции носителей заряда, получаем для модели с учетом спин-орбитального взаимодействия:

$$|P_{c1hh1}|^2 = 2\hbar^2 \gamma^2 A_1^2 H_1^2 k_{h1}^2 M I_{c1hh1}^2,$$

$$|P_{c2hh1}|^2 = 3\hbar^2 \gamma^2 A_2^2 H_1^2 q^2 M I_{c2hh1}^2,$$

$$|P_{c3hh1}|^2 = 2\hbar^2 \gamma^2 A_1^2 H_1^2 k_{h1}^2 M I_{c3hh1}^2,$$

$$|P_{c1hh2}|^2 = 3\hbar^2 \gamma^2 A_1^2 H_2^2 q^2 M I_{c1hh2}^2,$$

$$|P_{c2hh2}|^2 = 2\hbar^2 \gamma^2 A_2^2 H_2^2 k_{h2}^2 M I_{c2hh2}^2,$$

$$|P_{c1lh1}|^2 = \hbar^4 \gamma^4 A_1^2 L_1^2 q^2 M I_{c1lh1} \left(\frac{1 + 3\lambda_l^2}{Z_1^2} + \frac{1 + 3\lambda_c^2}{Z^2} \right),$$

$$|P_{c2lh1}|^2 = 2\hbar^4 \gamma^4 A_2^2 L_1^2 k_{l1}^2 \times \left(M I_{c2lh1} \frac{1 + \lambda_l^2}{Z_1^2} + M I_{c2lh1}^2 \frac{1 + \lambda_c^2}{Z^2} \right).$$

(II, II, 1)

Здесь

$$M I_{ij} = \frac{\sin(k_i + k_j) \frac{a}{2}}{k_i + k_j} + \frac{\sin(k_i - k_j) \frac{a}{2}}{k_i - k_j},$$

$$M I I_{ij} = \frac{\sin(k_i + k_j) \frac{a}{2}}{k_i + k_j} - \frac{\sin(k_i - k_j) \frac{a}{2}}{k_i - k_j}.$$

Без учета спин-орбитального взаимодействия получаем:

$$|P_{c1hh1}|^2 = \hbar^2 \gamma^2 A_1^2 H_1^2 k_{h1}^2 M I_{c1hh1}^2,$$

$$|P_{c2hh1}|^2 = 2\hbar^2 \gamma^2 A_2^2 H_1^2 q^2 M I_{c2hh1}^2,$$

$$|P_{c3hh1}|^2 = \hbar^2 \gamma^2 A_1^2 H_1^2 k_{h1}^2 M I_{c3hh1}^2,$$

$$|P_{c1hh2}|^2 = 2\hbar^2 \gamma^2 A_1^2 H_2^2 q^2 M I_{c1hh2}^2,$$

$$|P_{c2hh2}|^2 = \hbar^2 \gamma^2 A_2^2 H_2^2 k_{h2}^2 M I_{c2hh2}^2,$$

$$|P_{c1lh1}|^2 = \hbar^4 \gamma^4 A_1^2 L_1^2 q^2 M I_{c1lh1} \times \left(\frac{1}{(E_{lh} + E_g)^2} + \frac{1}{(E_c + E_g)^2} \right).$$

$$|P_{c2lh1}|^2 = 2\hbar^4 \gamma^4 A_2^2 L_1^2 k_{l1}^2 \times \left(\frac{M I I_{c2lh1}^2}{(E_{lh} + E_g)^2} + \frac{M I_{c2lh1}^2}{(E_c + E_g)^2} \right).$$

(II, II, 2)

Список литературы

- [1] G.G. Zegrya. In: *Antimonide-Related Strained-Layer Heterostructures*, ed. by M.O. Manasreh (Gordon and Breach Science Publishers, Amsterdam, 1997) p. 273.
- [2] M.P. Mikhailova, L.V. Danilov, K.V. Kalinina, E.V. Ivanov, N.D. Stoyanov, G.G. Zegrya, Y.P. Yaklovec, A. Hospodkova, J. Pangrac, M. Zikova, E. Hulicius. In: *The Wonder of Nanotechnology: Quantum Optoelectronic Devices and Applications*, ed. By M. Razeghi, L. Esaki, K. von Klitzing (SPIE Press, Bellingham, WA, 2013) p. 105.
- [3] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan. *J. Appl. Phys.* **89**, 5815 (2001).
- [4] S.A. Cripps et al. *Appl. Phys. Lett.* **90**, 1721 (2007).
- [5] L.V. Asryan, N.A. Gun'ko, A.S. Polkovnikov, G.G. Zegrya, R.A. Suris, P.-K. Lau, T. Makino. *Semicond. Sci. Technol.*, **15**, 1132 (2000).
- [6] Л.В. Данилов, Г.Г. Зегря. *ФТП*, **42**, 573 (2007).
- [7] В.Н. Абакумов, В.И. Перель, И.Н. Ясиевич. *Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках* (СПб., Изд-во ПИЯФ, 1997).
- [8] Г.Г. Зегря, А.С. Полковников. *ЖЭТФ*, **113**, 1491 (1998).
- [9] Л.В. Данилов, Г.Г. Зегря. *ФТП*, **42**, 566 (2007).
- [10] Л.Е. Воробьев, С.Н. Данилов, Г.Г. Зегря и др. *Фотоэлектрические явления в полупроводниках и размерно-квантованных структурах* (СПб., Наука, 2001).

Редактор Т.А. Полянская

Optical properties of heterostructures with deep quantum wells $\text{AlSb/InAs}_{0.86}\text{Sb}_{0.14}/\text{AlSb}$

N.V. Pavlov, G.G. Zegrya

Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St-Petersburg, Russia

Abstract This paper the dimensional quantization energies, the absorption coefficients and the radiative recombination rates for interband optical transitions between different dimensional quantization subbands in the heterostructure with deep quantum well $\text{AlSb/InAs}_{0.86}\text{Sb}_{0.14}/\text{AlSb}$ are calculated with the Kane model in the approximation of the neglecting of spin-orbit interaction and taking it into account. It is shown that the spin-orbit interaction corrections values, do not exceed several tens of percent, even for the spin-orbit interaction constant values exceeding the band gap. It is also shown that taking the carriers energy spectrum nonparabolicity into account is more important than the spin-orbit interaction in the dimensional quantization energies and the absorption coefficients calculating but it is necessary to take both effects into account in the radiative recombination rates calculating.