01;07

Влияние непараболичности энергетического спектра носителей заряда на оптические характеристики гетероструктур с глубокими квантовыми ямами $AlSb/InAs_{0.84}Sb_{0.16}/AlSb$

© Н.В. Павлов, Г.Г. Зегря

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург
E-mail: pavlovnv@mail.ru

Поступило в Редакцию 27 апреля 2014 г.

Исследованы оптические характеристики гетероструктур с глубокими квантовыми ямами на примере структуры состава $AlSb/InAs_{0.84}Sb_{0.16}/AlSb$ с учетом непараболичности энергетического спектра носителей заряда в рамках четырехзонной модели Кейна. Показано, что учет эффекта непараболичности слабо влияет на интеграл перекрытия между s- и p-состояниями, однако приводит к значительному увеличению величины плотности состояний в зоне проводимости, что становится причиной существенного роста коэффициента поглощения излучения.

Гетероструктуры с глубокими квантовыми ямами на основе твердых растворов InAsSb в качестве активной области являются одними из наиболее актуальных материалов инфракрасной оптоэлектроники [1,2]. Эти соединения характеризуются минимальными значениями ширины запрещенной зоны и эффективной массы электронов среди полупроводников A_3B_5 [3,4], что является причиной существенной непараболичности энергетического спектра носителей заряда, влияние которой приводит к значительным поправкам к энергии уровней размерного квантования по сравнению с параболическим законом дисперсии даже для основного состояния в зоне проводимости.

Целью настоящей работы является расчет коэффициента поглощения и скорости излучательной рекомбинации для межзонных оптических переходов между различными подзонами размерного квантования с учетом и без учета непараболичности энергетического спектра носителей заряда в гетероструктуре с глубокой квантовой ямой AlSb/$InAs_{0.84}Sb_{0.16}$/AlSb. Учет непараболичности энергетического спектра носителей заряда производился в рамках четырехзонной модели Кейна.

При расчетах мы будем использовать волновые функции электронов и тяжелых дырок вида $\psi = \boldsymbol{\Psi}_s|s\rangle + \boldsymbol{\Psi}|\boldsymbol{p}\rangle$, полученные в работе [5], где $|S\rangle$ и $|\boldsymbol{p}\rangle$ — блоховские функции s- и p-типа, $\boldsymbol{\Psi}_s$ и $\boldsymbol{\Psi}$ — спиноры. Для легких дырок будем использовать волновые функции, полученные из кейновских уравнений [5] с учетом предположения малости членов $\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + 4\gamma_2)\nabla(\nabla\boldsymbol{\Psi})$ и $\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - 2\gamma_2)\nabla \times (\nabla \times \boldsymbol{\Psi})$ по сравнению с $(E_g + \delta - E)\boldsymbol{\Psi}$, что равносильно приближению $\frac{m_c}{m_h} \ll 1$, где m_0 — масса свободного электрона, γ_1 и γ_2 — обобщенные параметры Латтинжера, $\delta = \Delta_{s0}/3$ — константа спин-орбитального расщепления, m_c и m_h — эффективные массы электронов и тяжелых дырок соответственно.

Энергетические спектры носителей заряда без учета непараболичности будут выглядеть следующим образом:

$$E_c = \frac{\hbar^2(k_c^2 + q^2)}{2m_c}, \tag{1a}$$

$$E_{hh} = -E_g - \frac{\hbar^2(k_h^2 + q^2)}{2m_h}, \tag{1b}$$

$$E_{lh} = -E_g - \frac{\hbar^2(k_l^2 + q^2)}{2m_l}, \tag{1c}$$

где E_c, E_{hh}, E_{lh} — энергия электронов, тяжелых и легких дырок соответственно, отсчитанная от дна зоны проводимости, k_c, k_h, k_l — квантованные компоненты волновых векторов электронов, тяжелых и легких дырок соответственно, m_l — эффективная масса легких дырок, q — компонента волнового вектора в плоскости квантовой ямы.

Энергетический спектр с учетом непараболичности для электронов:

$$\hbar^2\gamma^2(k_c^2 + q^2) = \frac{E(E + E_g)(E + E_g + 3\delta)}{E + E_g + 2\delta}, \tag{2a}$$

Таблица 1. Значения энергии и квантованных компонент волновых векторов для различных уровней размерного квантования в гетероструктуре состава AlSb/$InAs_{0.84}Sb_{0.16}$/AlSb при ширине квантовой ямы $a = 10\,\mathrm{nm}$ с учетом и без учета непараболичности энергетического спектра носителей заряда

Уровень размерного квантования	Без учета непараболичности		С учетом непараболичности	
	Квантованная компонента волнового вектора $k,\ 10^6\,\mathrm{cm}^{-1}$	Энергия уровня E, meV	Квантованная компонента волнового вектора $k,\ 10^6\,\mathrm{cm}^{-1}$	Энергия уровня E, meV
$c1$	2.78	163	2.56	101
$c2$	5.48	632	5.32	293
$c3$	7.45	1170	8.18	509
$hh1$	2.66	6	2.66	6
$hh2$	5.3	26	5.3	26
$lh1$	1.91	74	1.19	27

для легких дырок:

$$\hbar^2\gamma^2(k_c^2 + q^2) = \frac{E'_{lh}(E'_{lh} - E_g)(E'_{lh} - 3\delta)}{E'_{lh} - 2\delta}, \tag{2b}$$

где γ — кейновский матричный элемент размерности скорости, а $E'_{lh} = -E_g - E_{lh}$.

В табл. 1 приведены значения энергии и квантованных компонент волновых векторов, полученные без учета и с учетом непараболичности для ширины квантовой ямы $a = 100\,\mathrm{nm}$. Видно, что учет непараболичности энергетического спектра электронов при расчете положения уровней размерного квантования играет весьма существенную роль.

Зависимость коэффициента поглощения от частоты оптического перехода $\alpha(\omega)$ можно найти из следующего выражения [6]:

$$\alpha(\omega) = \sum_{i,j} \frac{4\pi}{\sqrt{\kappa_0}} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{1}{a\hbar\omega} \int q\,dq\,P_{ij}^2\,\delta\big(E_i(q) - E_j(q) - \hbar\omega\big), \tag{3}$$

где индексы i, j относятся к различным подзонам в зоне проводимости и в валентной зоне соответственно, κ_0 — статическая диэлектрическая проницаемость, $P_{ij}^2 = 2|P_{ij}^x|^2 + |P_{ij}^{\|}|^2$, а матричный элемент $\boldsymbol{P}_{ij}$ в четырехзонной модели Кейна имеет вид:

$$\boldsymbol{P}_{ij} = i\hbar\gamma \int (\bar{\Psi}_{si}\boldsymbol{\Psi}_j + \bar{\boldsymbol{\Psi}}_i \Psi_{sj})dx. \tag{4}$$

Используя свойства дельта-функции, выражение для коэффициента поглощения можно привести к следующему виду:

$$\alpha(\omega)_{ij} = \frac{2\pi}{\sqrt{\kappa_0}} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{1}{a\hbar\omega} P_{ij}^2(E_i) \frac{dq^2(E_i)}{dE_i}, \tag{5}$$

где $E_i = \hbar\omega - E_g - E'_j$, а производная равна:

$$\frac{dq^2(E_i)}{dE_i} = \frac{1}{\hbar^2\gamma^2}\left(2E_i + E_g - \frac{2\delta^2(E_g + 2\delta)}{(E_i + E_g + 2\delta)^2}\right) \tag{6a}$$

с учетом непараболичности,

$$\frac{dq^2(E_i)}{dE_i} = \frac{2m_c}{\hbar^2} \tag{6b}$$

без учета непараболичности.

Для переходов $c1{-}hh1$ и $c2{-}hh1$ выражение для величины P_{ij}^2 будет иметь вид:

$$|P_{c1hh1}|^2 = 2\hbar^2\gamma^2 A_1^2 H_1^2 k_{h1}^2 MI_{c1hh1}^2, \tag{7a}$$

$$|P_{c2hh1}|^2 = 3\hbar^2\gamma^2 A_2^2 H_1^2 q^2 MII_{c2hh1}^2, \tag{7b}$$

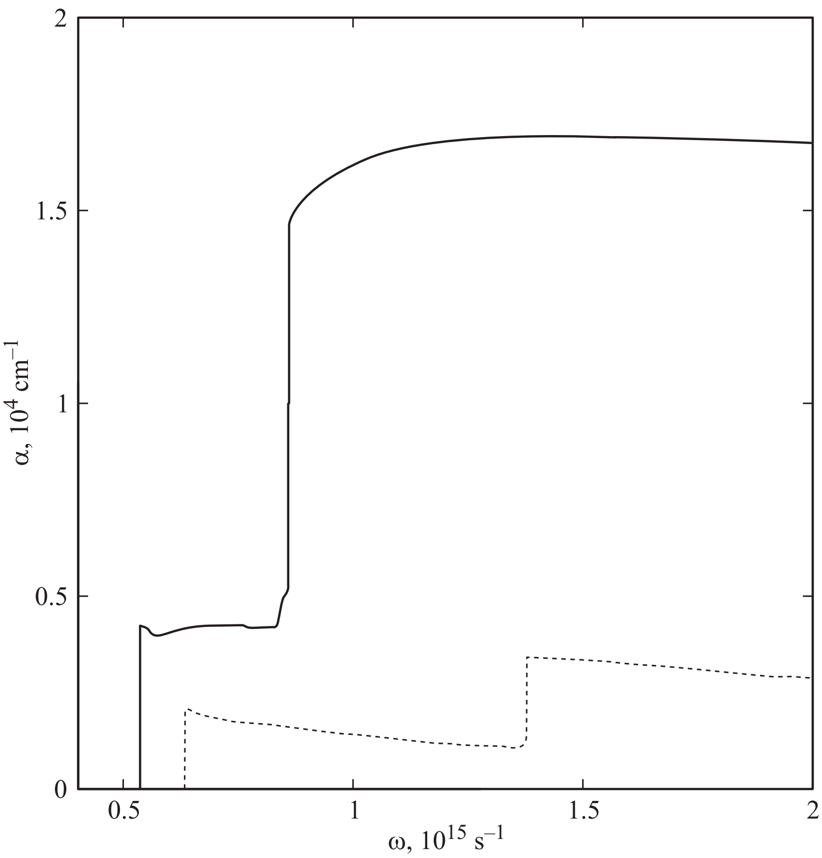
здесь A_1, A_2, H_1 — нормировочные коэффициенты, а величины

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

и

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

пропорциональны интегралам перекрытия волновых функций носителей заряда, для большинства переходов учет непараболичности энергетического спектра носителей заряда приводит к незначительному увеличению значений величин MI_{ij}^2 и MII_{ij}^2.



Зависимость суммарного коэффициента поглощения от частоты оптического перехода при ширине квантовой ямы $a = 100$ A, рассчитанная в рамках модели параболического спектра (пунктирная линия) и в рамках четырехзонной модели Кейна (сплошная линия).

На рисунке представлены на одном графике зависимости суммарного коэффициента поглощения от частоты для обоих приближений. Видно, что учет непараболичности приводит к увеличению коэффициента поглощения в несколько раз за счет увеличения величины $\frac{dq^2(E_i)}{dE_i}$,

Таблица 2. Время излучательной рекомбинации $\tau_{phi\,j}$ для различных оптических переходов в гетероструктуре AlSb/InAs$_{0.84}$Sb$_{0.16}$/AlSb для случая невырожденных электронов и для случая сильного вырождения ($n = 5 \cdot 10^{12}\,\text{cm}^{-2}$)

Переход	Без учета непараболичности		С учетом непараболичности	
	случай невырожденных электронов $\tau_{phi\,j}$, s	случай сильного вырождения $\tau_{phi\,j}$, s	случай невырожденных электронов $\tau_{phi\,j}$, s	случай сильного вырождения $\tau_{phi\,j}$, s
$c1-hh1$	$9 \cdot 10^{-9}$	$8 \cdot 10^{-9}$	$1.2 \cdot 10^{-8}$	$1.5 \cdot 10^{-8}$
$c2-hh1$	$3 \cdot 10^{-8}$		$2 \cdot 10^{-8}$	
$c3-hh1$	$4 \cdot 10^{-7}$		$1.003 \cdot 10^{-3}$	
$c1-hh2$	$5 \cdot 10^{-7}$	$3 \cdot 10^{-8}$	$2 \cdot 10^{-7}$	$7 \cdot 10^{-8}$
$c2-hh2$	$5 \cdot 10^{-9}$		$1.01 \cdot 10^{-8}$	
$c1-lh1$	$3 \cdot 10^{-6}$	$4 \cdot 10^{-7}$	$5 \cdot 10^{-7}$	$1.1 \cdot 10^{-7}$
$c2-lh2$	$3 \cdot 10^{-6}$		$3 \cdot 10^{-6}$	

которая представляет собой (с точностью до постоянного множителя) двумерную плотность состояний в зоне проводимости.

Скорость излучательной рекомбинации в квантовых ямах можно рассчитать по формуле [6]:

$$R_{ph} = \frac{4\kappa_\infty}{\pi\sqrt{\kappa_0}} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{1}{\hbar^3 c^2} \sum_{ij} \int q dq |P_{ij}|^2 f_i(q) f_j(q) \big(E_i(q) - E_j(q)\big). \quad (8)$$

Здесь κ_∞ — высокочастотная диэлектрическая проницаемость, f_i, f_j — функции распределения носителей.

Для невырожденных электронов за характерное значение q удобно взять значение $q_T \approx \frac{\sqrt{2k_B T m_c}}{\hbar}$, где T — абсолютная температура. Так как

$$\int q dq f_i(q) f_j(q) \approx \pi \frac{n_i p}{N_\nu} \exp\left(-\frac{\varepsilon_j}{k_B T}\right),$$

где $N_\nu = \frac{m_h k_B T}{\pi\hbar^2}$ — эффективная плотность состояний в валентной зоне, n, p — двумерные концентрации электронов и дырок, ε_j — расстояние между потолком j-й подзоны размерного квантования и потолком основной подзоны тяжелых дырок, то скорость излучательной рекомбинации будет равна:

$$R_{ph} = \frac{4\kappa_\infty}{\sqrt{\kappa_0}} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{1}{\hbar^3 c^2} \times \sum_{ij} |P_{ij}(q_T)|^2 \big(E_i(q_T) - E_j(q_T)\big) \frac{n_i p}{N_\nu} \exp\left(-\frac{\varepsilon_j}{k_B T}\right). \quad (9)$$

Для невырожденных носителей время излучательной рекомбинации для каждого отдельного перехода будет иметь вид:

$$\tau_{phij} = \frac{n_i}{R_{ij}} = \frac{\sqrt{\kappa_0}}{4\pi\kappa_\infty} \frac{\hbar c}{e^2} \frac{\hbar c^2 m_h k_B T}{p|P_{ij}(q_T)|^2 \big(E_i(q_T) - E_j(q_T)\big)} \exp\left(\frac{\varepsilon_j}{k_B T}\right). \quad (10)$$

В случае, когда электроны вырождены, в формулу (10) вместо q_T нужно подставить q_F.

В табл. 2 представлены результаты расчетов времени излучательной рекомбинации для $a = 10\,\text{nm}$ при температуре $T = 300\,\text{K}$ и концентрации дырок $p = 10^{12}\,\text{cm}^{-2}$. Видно, что для случая невырожденных электронов учет непараболичности приводит к увеличению времени излучательной рекомбинации для переходов с совпадающей четностью начального и конечного состояний и к уменьшению, если четности начального и конечного состояния различны.

Таким образом, в данной работе показано, что в гетероструктурах с глубокими квантовыми ямами непараболичность энергетического спектра носителей заряда существенно влияет на положение уровней энергии размерного квантования и приводит к значительному росту коэффициента поглощения излучения, особенно для оптических переходов с участием высокоэнергетичных электронов.

Список литературы

[1] *Zegrya G.G.* Mid-Infrared Strained Diode Lasers. // Antimonide-Related Strained-Layer Heterostructures / Ed. by M.O. Manasreh. Amsterdam: Gordon and Breach Science Publishers, 1997. P. 273.

[2] *Mikhailova M.P., Danilov L.V., Kalinina K.V., Ivanov E.V., Stoyanov N.D., Zegrya G.G., Yakovlev Y.P., Hospodkova A., Pangrac J., Zikova M., Hulicius E.* Superlinear Luminescence and Enhancement of Optical Power in GaSb-based Heterostructures with High Conduction-Band Offsets and Nanostructures with Deep Quantum Wells // The Wonder of Nanotechnology: Quantum Optoelectronic Devices and Applications / Ed. by M. Razeghi. L. Esaki, K. von Klitzing. Bellingham, WA: SPIE Press, 2013. P. 105.
[3] *Vurgaftman I., Meyer J.R., Ram-Mohan L.R.* // J. Appl. Phys. 2001. V. 89. P. 5815.
[4] *Cripps S.A.* et al. // Appl. Phys. Lett. 2007. V. 90. P. 1721.
[5] *Asryan L.V., Gun'ko N.A., Polkovnikov A.S., Zegrya G.G., Suris R.A., Lau P.-K., Makino T.* // Semicond. Sci. Technol. 2000. V. 15. P. 1132.
[6] *Зегря Г.Г., Полковников А.С.* // ЖЭТФ. 1998. V. 113. P. 1491.