ОПТИЧЕСКОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ НА ГЕТЕРОГРАНИЦЕ

Шик А. Я.

Теоретически рассмотрено внутризонное оптическое поглощение в гетероструктурах на основе полупроводников, описываемых моделью Кейна. Показано, что различие в эффективных массах компонент гетеропары и наличие сложной структуры валентной зоны приводят к заметному поглощению света, поляризованного не только перпендикулярно, но и параллельно гетерогранице. Первый фактор мало существен для переходов между низшими уровнями в квантовой яме, но зато весьма заметен для выброса из квантовой ямы в вышележащий континуум состояний. Второй фактор существен для полупроводников с большой величиной спин-орбитального расщепления валентной зоны.

Как известно, в однородном полупроводнике поглощение света свободными носителями возможно лишь при наличии рассеяния. В гетероструктурах же благодаря рассеянию импульса на разрывах энергетических зон реализуются и иные возможности внутризонного поглощения, в том числе межуровневые переходы в квантовых ямах (КЯ) [1] и оптический выброс из КЯ [2]. Простейшая теория подобных эффектов, построенная в модели постоянной эффективной массы [3, 4], свидетельствует о том, что такие переходы вызываются лишь светом, поляризованным перпендикулярно гетерогранице. Однако указанная модель является чрезмерно упрощенной. Действительно, в модели Кейна, хорошо описывающей прямозонные полупроводники класса $A^{III}B^{V}$, ширина запрещенной зоны ε_g и эффективная масса электронов m_e связаны друг с другом, и поэтому учитывать разрывы зон и одновременно пренебрегать изменениями m_e на гетерограницах было бы непоследовательно. В данной работе показано, что более строгий учет зонной картины в гетероструктурах приводит к внутризонному поглощению при любой поляризации света.

Рассмотрим произвольную гетероструктуру, в которой состав полупроводника, определяющий энергетическое положение краев зоны проводимости (ε_c), валентной (ε_v) и спин-отщепленной ($\varepsilon_v-\Delta$) зон, зависит от координаты z [наряду с этим может существовать и электростатический потенциал $U(z)$, определяемый объемным зарядом]. Будем считать, что наша полупроводниковая структура описывается кейновской моделью с зависящими от z параметрами ε_c, ε_v, $\varepsilon_g\equiv\varepsilon_c-\varepsilon_v$ и Δ. Величину межзонного матричного элемента P будем считать константой, поскольку, как известно [5], она мало различается во всех соединениях $A^{III}B^{V}$.

Решение уравнения Шредингера, определяющее энергии E_i и волновые функции Ψ_i системы, ищем в виде

$$\Psi_i=\sum_{\gamma=1}^{4} u_\gamma \exp\left[i\left(k_x x+k_y y\right)\right]\chi_i^{(\gamma)}(z), \tag{1}$$

где u_γ — базисные волновые функции, меняющиеся соответственно как $iS\uparrow$, $(-1/\sqrt{2})(X+iY)\downarrow$, $Z\uparrow$ и $(1/\sqrt{2})(X-iY)\downarrow$ (см., например, [6]). Уравнение Шредингера при этом превращается в систему уравнений для $\chi_i^{(\gamma)}$:

$$(\varepsilon_c-E_i+U)\chi_i^{(1)}-\frac{\hbar k_+}{m_0}P\chi_i^{(2)}-i\frac{\hbar}{m_0}P\frac{d\chi_i^{(3)}}{dz}+\frac{\hbar k_-}{m_0}P\chi_i^{(4)}=0,$$

$$\frac{\hbar k_-}{m_0} P\chi_i^{(1)} + \left(\varepsilon_v - \frac{2\Delta}{3} - E_i + U\right)\chi_i^{(2)} + \frac{\sqrt{2}}{3}\Delta\chi_i^{(3)} = 0,$$

$$-i\frac{\hbar}{m_0} P \frac{d\chi_i^{(1)}}{dz} + \frac{\sqrt{2}}{3}\Delta\chi_i^{(2)} + \left(\varepsilon_v - \frac{\Delta}{3} - E_i + U\right)\chi_i^{(3)} = 0, \tag{2}$$

$$-\frac{\hbar k_+}{m_0} P\chi_i^{(1)} + (\varepsilon_v - E_i + U)\chi_i^{(4)} = 0$$

$[k_\pm = (k_x \pm ik_y)/\sqrt{2}]$.

Считая, что речь идет о достаточно узкозонных полупроводниках, в которых $m_e \ll m_0$ (m_0 — масса свободного электрона), при написании (2) мы пренебрегали членами со вторыми производными $\chi_i^{(\gamma)}$, имеющими малость $\sim m_e/m_0$.

Рассмотрим состояния в зоне проводимости при $k_x = k_y = 0$. Обозначая соответствующие значения энергии через E_i^0, получаем из (2) уравнение для $\chi_i^{(1)}$

$$[\varepsilon_c(z) - E_i^0 + U(z)]\,\chi_i^{(1)}(z) - \frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dz}\left[\frac{1}{m_i(z)}\frac{d\chi_i^{(1)}}{dz}\right] = 0. \tag{3}$$

Это — уравнение Шредингера, в котором роль зависящей от координаты эффективной массы играет величина

$$m_i(z) \equiv \frac{m_0^2}{2\hbar^2 P^2}\,\frac{\frac{2}{9}\Delta^2 - \left(\varepsilon_v - \frac{2\Delta}{3} - E_i^0 + U\right)\left(\varepsilon_v - \frac{\Delta}{3} - E_i^0 + U\right)}{\varepsilon_v - \frac{2\Delta}{3} - E_i^0 + U}. \tag{4}$$

На гетерограницах эта величина испытывает скачок, но $\chi_i^{(1)}$ и $(1/m_i)\,(d\chi_i^{(1)}/dz)$ остаются непрерывными (см. также [7]).

Аналогичная модель была ранее использована в [8] для расчета энергетического спектра гетероструктур. Поэтому, не останавливаясь более на вычислениях E_i, $\chi_i^{(\gamma)}$ и при необходимости адресуя читателя к [8], перейдем непосредственно к оптическим свойствам. Рассмотрим внутризонные оптические переходы между электронными уровнями E_i и E_j.

При z-поляризации света они определяются матричным элементом p_z, который, как можно показать, для $k_x = k_y = 0$ равен

$$\langle i\,|\,p_z\,|\,j\rangle = P\int\left(\chi_i^{(1)}\chi_j^{(3)} + \chi_j^{(1)}\chi_i^{(3)}\right)dz = \frac{i\hbar m_0}{2}\times$$

$$\times\int\left[\frac{1}{m_i}\chi_j^{(1)}\frac{d\chi_i^{(1)}}{dz} - \frac{1}{m_j}\chi_i^{(1)}\frac{d\chi_j^{(1)}}{dz}\right]dz \equiv Z_{ij}. \tag{5}$$

Учет k_x и k_y приведет к относительно малым поправкам к (5). При x-поляризации соответствующий матричный элемент имеет вид

$$\langle i\,|\,p_x\,|\,j\rangle = \frac{P}{\sqrt{2}}\int\left(\chi_i^{(1)}\chi_j^{(2)} + \chi_j^{(1)}\chi_i^{(2)}\right)dz =$$

$$= \frac{i\hbar m_0}{6}\int\left[\frac{\Delta\chi_j^{(1)}\frac{d\chi_i^{(1)}}{dz}}{m_i\left(\varepsilon_v - \frac{2\Delta}{3} - E_i + U\right)} - \frac{\Delta\chi_i^{(1)}\frac{d\chi_j^{(1)}}{dz}}{m_j\left(\varepsilon_v - \frac{2\Delta}{3} - E_j + U\right)}\right]dz +$$

$$+ \frac{\hbar m_0}{2\sqrt{2}}k_-\int\left[\frac{\varepsilon_v - \frac{\Delta}{3} - E_i + U}{m_i\left(\varepsilon_v - \frac{2\Delta}{3} - E_i + U\right)} + \frac{\varepsilon_v - \frac{\Delta}{3} - E_j + U}{m_j\left(\varepsilon_v - \frac{2\Delta}{3} - E_j + U\right)}\right]\chi_i^{(1)}\chi_j^{(1)}dz \equiv$$

$$\equiv X'_{ij} + X''_{ij}. \tag{6}$$

Видно, что (6) содержит два члена различной природы. Следовательно, корректный учет зонной структуры гетеропереходов выявляет сразу два возможных механизма поглощения света, поляризованного параллельно гетерогранице.

Первый механизм, определяемый членом X'_{ij}, связан с наличием спин-орбитального расщепления зон и исчезает при $\Delta \to 0$. Сравнивая (5) с первым членом в (6), видим, что, например, в прямоугольной квантовой яме их отношение, определяющее анизотропию поглощения,

$$\left|\frac{X'_{ij}}{Z_{ij}}\right| \simeq \frac{1}{3}\frac{\Delta}{\varepsilon_g + \frac{2}{3}\Delta}. \tag{7}$$

В структурах на основе GaAs, где $\Delta \ll \varepsilon_g$, это отношение достаточно мало́. Вместе с тем в гетероструктурах InAs—GaSb, также интенсивно исследуемых в последнее время, в обоих полупроводниках $\Delta \simeq \varepsilon_g$ и внутризонное поглощение света обеих поляризаций может иметь сравнимую величину.

Указанный эффект имеет ту же природу, что и поляризационная зависимость межзонного поглощения кейновских полупроводников в электрическом поле [9]. Там при энергиях кванта, близких к ε_g, состояния спин-отщепленной зоны не участвуют в оптических переходах. В этих условиях отношение коэффициентов поглощения при x- и z-поляризации α_x/α_z определяется относительным вкладом u_2 и u_3 в состояния легких дырок и равно $1/4$. В нашем случае состояние E_i содержат примесь различных валентных подзон, но при $\Delta \to \infty$ спин-отщепленная зона перестает играть роль, и из (7) видно, что $\alpha_x/\alpha_z = |X'_{ij}/Z_{ij}|^2 \to 1/4$, как и в [9].

Второй механизм поглощения, определяемый X''_{ij}, связан с координатной зависимостью параметров зонной структуры, в частности $m_i(z)$. (Легко видеть, что в отсутствие такой зависимости $X''_{ij}=0$ из-за ортогональности волновых функций $\chi_i^{(1)}$). На принципиальную возможность подобного поглощения указывалось в [10]. Физическая причина его состоит в следующем. Различие масс по обе стороны гетерограницы вызывает преломление на ней электронной волны с $k_- \neq 0$ и, как следствие, перемешивание движений, параллельных и перпендикулярных границе. В случае прямоугольной квантовой ямы, где $U(z) \simeq 0$, а ε_g и Δ меняются ступенчатым образом, для X''_{ij} можно получить весьма простое выражение.

Обозначая индексами w и b значения параметров зон в материалах ямы и барьера и учитывая ортогональность функций $\chi_i^{(1)}$ с различными i, нетрудно привести (6) к виду

$$X''_{ij} = \frac{\hbar m_0}{\sqrt{2}} k - \delta\left(\frac{1}{m}\right)\int\limits_{(b)} \chi_i^{(1)}\chi_j^{(1)} dz, \tag{8}$$

где в отличие от (6) интегрирование идет не по всем z, а лишь по областям, занимаемым широкозонными (барьерными) слоями. Здесь введено обозначение

$$\delta\left(\frac{1}{m}\right) = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{m_i}\frac{\varepsilon_v - \frac{\Delta}{3} - E_i}{\varepsilon_v - \frac{2\Delta}{3} - E_i} + \frac{1}{m_j}\frac{\varepsilon_v - \frac{\Delta}{3} - E_j}{\varepsilon_v - \frac{2\Delta}{3} - E_j}\right)_b - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{m_i}\frac{\varepsilon_v - \frac{\Delta}{3} - E_i}{\varepsilon_v - \frac{2\Delta}{3} - E_i} + \frac{1}{m_j}\frac{\varepsilon_v - \frac{\Delta}{3} - E_j}{\varepsilon_v - \frac{2\Delta}{3} - E_j}\right)_w. \tag{9}$$

Для подбарьерных, локализованных в квантовой яме состояний, энергия которых меньше величины барьера в зоне проводимости $\Delta\varepsilon_c \equiv \varepsilon_c^b - \varepsilon_c^w$, волновая функция в области барьера ($z > 0$) имеет вид

$$\chi_i^{(1)}(z) = \chi_i^{(1)\prime}(0)\exp\left\{-\frac{\sqrt{2m_i^b\left[\Delta\varepsilon_c - E_i^0 - \hbar^2 k_+ k_-\left(\frac{1}{m_i^w} - \frac{1}{m_i^b}\right)\right]}}{\hbar} z\right\}. \tag{10}$$

Поэтому если индекс i относится к одному из низших состояний ($E_i^0 \ll \Delta\varepsilon_c$) с быстро спадающей экспонентой (10), а j — к вышележащему подбарьерному состоянию или же к надбарьерному с достаточно малой энергией, то в интеграле (8) можно полагать $\chi_j^{(1)}(z) \simeq \chi_j^{(1)}(0)$, откуда

$$X''_{ij} \simeq \frac{\hbar^2 m_0}{2} k_- \delta\left(\frac{1}{m}\right) \frac{\chi_i^{(1)}(0)\,\chi_j^{(0)}(0)}{\sqrt{m_i^b \Delta\varepsilon_c}}. \tag{11}$$

Оценим отношение X''_{ij}/Z_{ij}. Ответ будет существенно различным в зависимости от того, в какое состояние происходит оптический заброс. Если $\chi_j^{(1)}$, так же как и $\chi_i^{(1)}$, соответствует одному из низших связанных состояний в квантовой яме шириной a, то

$$\int \chi_i^{(1)} \frac{d\chi_j^{(1)}}{dz} dz \sim \frac{1}{a}, \quad \chi_i^{(1)}(0) \sim \frac{1}{\sqrt{a}} \sqrt{\frac{E_i^0}{\Delta\varepsilon_c}} \sqrt{\frac{m_b}{m_w}}.$$

Поскольку $k_- \sim \sqrt{m_w E_F}/\hbar$, где E_F — энергия Ферми двумерного электронного газа, то

$$\frac{X''_{ij}}{Z_{ij}} \sim \sqrt{m_b m_w}\, \delta\left(\frac{1}{m}\right) \sqrt{\frac{E_i^0 E_j^0 E_F}{(\Delta\varepsilon_c)^3}}. \tag{12}$$

Если же $\chi_j^{(1)}$ отвечает состоянию континуума с малой кинетической энергией $E_j^0 - \Delta\varepsilon_c$, то ситуация резко меняется. Рассмотрим в качестве примера треугольную яму, представляющую собой хорошую аппроксимацию для одиночной гетероструктуры. Квазиклассическая волновая функция состояния E_j^0 имеет вид

$$\chi_j^{(1)}(z) = \chi_j^{(1)}(0) \sin\left\{\frac{2}{3\hbar}\left[2\left(z - \frac{E_j^0}{eF}\right)^3 eFm_w\right]^{1/2} + \varphi\right\}, \tag{13}$$

где F — электрическое поле, а фаза φ определяется из условия сшивки на гетерогранице, которое при $E_j^0 \simeq \Delta\varepsilon_c$ требует, чтобы $d\chi_j^{(1)}/dz\,|_{z=0} = 0$. Если в качестве $\chi_i^{(1)}$ взять известную функцию низшего уровня в треугольной яме, то вычисления дают

$$\int \chi_i^{(1)} \frac{d\chi_j^{(1)}}{dz} dz \sim \frac{1}{\sqrt{a}} \chi_j^{(1)}(0) \frac{E_i^0}{\Delta\varepsilon_c}. \tag{14}$$

Аналогичное утверждение можно сделать и для прямоугольной ямы. Окончательный ответ при этом имеет вид

$$\frac{X''_{ij}}{Z_{ij}} \sim m_w \delta\left(\frac{1}{m}\right) \sqrt{\frac{E_F}{E_i^0}}. \tag{15}$$

Оценим степень анизотропии поглощения, описываемую формулами (12), (15). Для реальных гетероструктур $GaAs-Al_xGa_{1-x}As$ с $x=0.3-0.4$ параметры $m_w\delta\,(1/m)$ и $\sqrt{m_b m_w}\delta\,(1/m)$ составляют несколько десятых, величина $\Delta\varepsilon_c = 0.2-0.3$ эВ, а E_1^0 — как правило, несколько сотых электронвольта. В типичных структурах с модулированным легированием концентрация носителей $n_s=(2 \div 4)\cdot 10^{11}$ см$^{-2}$, что соответствует энергии Ферми E_F, имеющей тот же порядок, что и E_1^0. Таким образом, при оптических переходах между локализованными состояниями в квантовых ямах [см. (12)] скачки эффективной массы на гетерограницах приводят лишь к относительно слабому ($\alpha_x \ll \alpha_z$) поглощению.[1] При оптическом же выбросе из ямы α_x возрастает и в припороговой области частот может стать сравнимой с α_z [см. (15)], которая в этой области, напротив, уменьшается. Это хорошо согласуется с экспериментом. Переходы между первым и вторым уровнями в квантовых ямах наблюдались лишь при

---

[1] Отметим, что в симметричных квантовых ямах для запрещенных переходов между состояниями одинаковой четности $Z_{ij} \simeq 0$ и подобной анизотропии α не будет. В обеих поляризациях будет сравнимое по величине небольшое поглощение за счет механизмов, рассмотренных в данной работе.

z-поляризации света [1], а в опытах по оптическому выбросу из квантовой ямы в континуум заметной поляризационной зависимости не обнаруживалось [2, 11].

В заключение заметим, что наш расчет идейно близок работе Завадского [12], посвященной вычислению межуровневого поглощения за счет непараболичности в поверхностных каналах узкозонных полупроводников. Ее автор, однако, не учитывал спин-орбитального взаимодействия (полагая $\Delta=0$), рассматривал лишь гомоструктуры (полагая $\varepsilon_{\parallel}=\mathrm{const}$) и ограничивался исследованием переходов между локализованными состояниями в яме. В силу первого обстоятельства он не получил поглощения, связанного с X'_{ij}, а в силу последнего в ходе расчета величины, аналогичной нашему X''_{ij}, получил лишь слабый эффект типа (12), пройдя мимо более сильного поглощения (15).

Автор благодарит В. И. Переля за обсуждения и критические замечания.

Литература

[1] Levine B. F. et al. — Appl. Phys. Lett., 1987, v. 50, N 5, p. 273—275.
[2] Гродненский И. М., Старостин К. В., Галченков Д. В. — Письма ЖЭТФ, 1986, т. 43, в. 1, с. 54—56.
[3] Рытова Н. С. — ФТТ, 1966, т. 8, в. 9, с. 2672—2678.
[4] Шик А. Я. — ФТП, 1986, т. 20, в. 9, с. 1598—1604.
[5] Маделунг О. Физика полупроводниковых соединений элементов III и V групп. М., 1967. 477 с.
[6] Ансельм А. И. Введение в теорию полупроводников. М., 1978. 615 с.
[7] Bastard G. — Phys. Rev. B, 1981, v. 24, N 10, p. 5693—5697.
[8] Сурис Р. А. — ФТП, 1986, т. 20, в. 11, с. 2008—2015.
[9] Келдыш Л. В., Константинов О. В., Перель В. И. — ФТП, 1969, т. 3, в. 7, с. 1042—1053.
[10] Васько Ф. Т., Солдатенко Ю. Н. — ФТП, 1986, т. 20, в. 5, с. 920—922.
[11] Старостин К. В. — Автореф. канд. дис. М., 1987.
[12] Zawadski W. — J. Phys. C, 1983, v. 16, N 1, p. 229—240.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Получена 13.05.1988
Принята к печати 2.06.1988