

ЗОННАЯ СТРУКТУРА НАПРЯЖЕННЫХ (001) СВЕРХРЕШЕТОК $(\text{InAs})_n(\text{GaAs})_n$

Полыгалов Ю. И., Поплавной А. С.

По методу эмпирического псевдопотенциала с учетом спин-орбитального взаимодействия проведен расчет зонного спектра напряженных (001) сверхрешеток (СР) $(\text{InAs})_n(\text{GaAs})_n$ ($n=2, 4$). Рассмотрены два варианта подстройки слоев InAs и GaAs в СР. В первом варианте $(\text{InAs})_n^{\text{напр}}(\text{GaAs})_n$ напряжен только слой InAs (выращивание по подложке GaAs), во втором — слой InAs и GaAs. Показано, что в обоих вариантах вершина валентной зоны и дно зоны проводимости в среднем на $\sim 95\%$ происходят из уровней $\Gamma_8 + \Gamma_7 + \Gamma_6$ сфалерита соответственно. Рассчитаны поляризационные зависимости оптических переходов из вершины валентной зоны на дно зоны проводимости в СР. Показано, что переход $V_1 \rightarrow C_1$ разрешен практически только для перпендикулярной относительно оси роста СР поляризации света. Переходы $V_{2,3} \rightarrow C_1$ разрешены при обеих поляризациях, при этом в СР $(\text{InAs})_2^{\text{напр}}(\text{GaAs})_2$ для $V_2 \rightarrow C_1$ отношение $J_{\parallel}/J_{\perp} \sim 0.4$, а для $V_3 \rightarrow C_1$ $J_{\parallel}/J_{\perp} \sim 12$. В случае СР $(\text{InAs})_2^{\text{напр}}(\text{GaAs})_2^{\text{напр}}$ из-за более тесной группировки уровней валентной зоны и зоны проводимости поляризационная зависимость переходов $V_{2,3} \rightarrow C_1$ оказывается примерно одинаковой, отношение $J_{\parallel}/J_{\perp} \sim 2$. Вычисленные эффективные массы электронов в СР оказались слабо анизотропными ($m_{\parallel}/m_{\perp} \sim 1.2 \div 1.4$), в то время как эффективные массы дырок в верхней валентной зоне сильно анизотропны ($m_{\parallel}/m_{\perp} \sim 11 \div 13$). Для СР $(\text{InAs})_4^{\text{напр}}(\text{GaAs})_4^{\text{напр}}$ структура уровней вблизи вершины валентной зоны оказалась подобной той, которая имеет место в $(\text{InAs})_2^{\text{напр}}(\text{GaAs})_2^{\text{напр}}$. В СР $(\text{InAs})_4^{\text{напр}}(\text{GaAs})_4$ из-за сильной деформированности InAs наблюдались сближение и перекрытие уровней, произошедших из точки Γ и точек (00λ) сфалерита, так что в итоге вблизи вершины валентной зоны сгруппировалось семь подзон. При этом переходы $V_{1,2} \rightarrow C_1$ в основном проявляются при поляризации света, перпендикулярной оси роста СР, в то время как переходы $V_{5,7} \rightarrow C_1$ — при параллельной; вероятности переходов $V_{3,4,6} \rightarrow C_1$ оказались близкими к нулю, из-за того что они аналогичны переходам $\Delta(00\lambda) \rightarrow \Gamma(000)$ в сфалерите.

Напряженные сверхрешетки (СР) — высокоточные многослойные структуры, растущие из материалов с несовпадающими периодами, привлекают в последнее время все возрастающее внимание исследователей (см. обзор [1]). Большое ($> 0.1\%$) несовпадение периодов составляющих СР материалов полностью компенсируется однородной упругой деформацией СР слоев, если толщина слоев выдерживается ниже определенной критической величины. Достигания в технике выращивания СР привели к созданию ультратонких структур на основе полупроводников $A^{III}B^V$, состоящих из нескольких (1–3) монослоев [2]. Интерес к этим материалам обусловлен обнаруженными новыми физическими свойствами, связанными с большими деформациями СР слоев.

В настоящей работе представлены результаты расчета зонного спектра модельных напряженных СР $(\text{InAs})_n(\text{GaAs})_n$ ($n=2, 4$), где n — число монослоев исходных материалов в направлении (001) оси роста. При проведении расчета использовались два варианта возможной реализации кристаллической структуры $(\text{InAs})_n(\text{GaAs})_n$. В первом варианте в СР $(\text{InAs})_n^{\text{напр}}(\text{GaAs})_n^{\text{напр}}$ подстройка монослоев друг к другу происходит путем двуслойной деформации и того, и другого материалов [всестороннее сжатие, затем растяжение вдоль оси (001) InAs и всестороннее растяжение, а затем сжатие вдоль оси (001) GaAs]. Во втором варианте в СР $(\text{InAs})_n^{\text{напр}}(\text{GaAs})_n$ при подстройке слоев предполагалась двуслойная деформация только InAs. Второй случай реализуется при выращивании СР на подложке из GaAs, в то время как первый относится к релаксированной вдали от подложки структуре.

Толщина d каждого материала в чередующихся слоях СР вдоль оси (001) роста определялась из соотношения

$$d = m [a_0 + \sigma (a_0 - a)], \quad (1)$$

где $\sigma = 2C_{12}/C_{11}$ — коэффициент Пуассона, C_{12} , C_{11} — упругие постоянные материала, a_0 — начальное значение постоянной решетки исходного материала, a — постоянная решетки исходного материала после всесторонней деформации, $m = n/2$.

Кристаллическая структура $(\text{InAs})_n(\text{GaAs})_n$ обладает симметрией C_{2v} со следующими основными векторами:

$$\begin{aligned} a_1 &= (a/2, a/2, 0), \\ a_2 &= (-a/2, a/2, 0), \\ a_3 &= (0, 0, d + d_1), \end{aligned} \quad (2)$$

где a — постоянная СР в плоскости, перпендикулярной оси роста, d — толщина слоя InAs, d_1 — толщина слоя GaAs в СР. Структуре с элементарными векторами (2) отвечают увеличенные в 4 раза для случая $n=2$ и в 8 раз для случая $n=4$ элементарные ячейки сфалерита. Зона Бриллюэна рассматриваемых СР и неприводимые представления групп волновых векторов построены, например, в [3].

Расчет зонной структуры $(\text{InAs})_n(\text{GaAs})_n$ проводился по методу псевдопотенциала с эмпирически определенными атомными форм-факторами псевдопотенциалов InAs и GaAs [4]. Значения форм-факторов для векторов обратной решетки СР находились сплайн-интерполяцией при соответствующей перенормировке на объем элементарной ячейки СР. Атомные форм-факторы, отвечающие нулевому вектору обратной решетки, полагались равными $2/3 E_F$ [4], где E_F — энергия Ферми газа валентных электронов. Учет разрыва валентной зоны GaAs относительно валентной зоны InAs проводился следующим образом. Согласно [5], вершина валентной зоны ненапряженного InAs лежит ниже вершины валентной зоны ненапряженного GaAs на величину 0.15 эВ. Для обеспечения этого разрыва была введена соответствующая поправка в форм-факторы псевдопотенциалов на нулевых векторах обратной решетки, что учитывалось при сплайн-интерполяции. Спин-орбитальное взаимодействие учитывалось по методу, предложенному в [6]. Для установления роли спин-орбитального взаимодействия в формировании энергетической зонной структуры вычисления проводились как с учетом, так и без учета спин-орбитального взаимодействия.

1. СР $(\text{InAs})_2(\text{GaAs})_2$

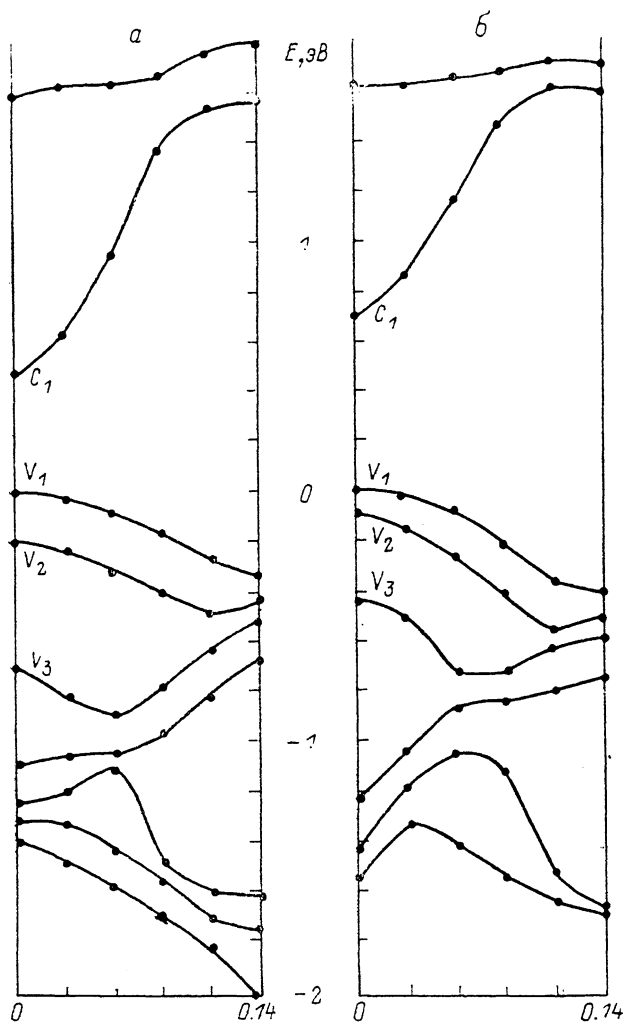
Построение матриц эффективного гамильтониана проводилось в базисе симметризованных комбинаций плоских волн (СКПВ). В случае $(\text{InAs})_2(\text{GaAs})_2$ в разложении псевдоволновой функции учитывалось ~ 350 спин-орбиталей.

На рисунке представлены результаты расчета зонного спектра $(\text{InAs})_2^{\text{нсп}}(\text{GaAs})_2$ и $(\text{InAs})_2^{\text{нсп}}(\text{GaAs})_2^{\text{нсп}}$ вдоль линии $[0, 0, 2\pi\mu/(d + d_1)]$ ($0 \leq \mu \leq 1/2$) зоны Бриллюэна СР. Дно зоны проводимости СР происходит на $\sim 97\%$ из уровня Γ_6 сфалерита, отвечающего дну зоны проводимости InAs и GaAs. Три верхних уровня в вершине валентной зоны на $\sim 95\%$ отвечают уровням Γ_8 и Γ_7 вершины валентной зоны сфалерита. Спин-орбитальное взаимодействие и деформированность слоев в СР дают одинаковый по порядку величины вклад в формирование ширины запрещенной зоны и расщеплений в вершине валентной зоны.

В таблице приведены вычисленные отношения интенсивностей для дипольных оптических переходов при поляризациях света, параллельной и перпендикулярной оси СР. Если не учитывать спин-орбитального взаимодействия, то переходы $V_1, V_2 \rightarrow C_1$ оказываются разрешенными только для перпендикулярной поляризации, а переход $V_3 \rightarrow C_1$ — для параллельной. Резкая поляризационная зависимость перехода $V_1 \rightarrow C_1$ сохраняется и при учете

спин-орбитального взаимодействия. Для СР $(\text{InAs})_2^{\text{напр}}(\text{GaAs})_2$ учет спин-орбитального взаимодействия приводит к появлению разрешенных переходов при параллельной поляризации $V_2, V_3 \rightarrow C_1$, при этом переход $V_3 \rightarrow C_1$ сохраняет достаточно резкую поляризационную зависимость (см. таблицу).

В случае СР $(\text{InAs})_2^{\text{напр}}(\text{GaAs})_2^{\text{напр}}$ из-за более тесной группировки уровней валентной зоны и зоны проводимости поляризационная зависимость переходов $V_{2,3} \rightarrow C_1$ оказывается примерно одинаковой.



Зонная структура $(\text{InAs})_2^{\text{напр}}(\text{GaAs})_2$ (а) и $(\text{InAs})_2^{\text{напр}}(\text{GaAs})_2^{\text{напр}}$ (б) вдоль линии $[0, 0, 2\pi/d(d+d_1)]$ ($0 \leq \mu \leq 1/2$) зоны Бриллюэна СР.

$d+d_1$ — период СР вдоль оси роста (в борновских радиусах).

Вычисление эффективных масс для зоны проводимости и верхней валентной зоны привело к следующим результатам. Эффективные массы в зоне проводимости оказались слабо анизотропными: $m_{C\parallel}/m_{C\perp} = 1.4$ для $(\text{InAs})_2^{\text{напр}}(\text{GaAs})_2$ и $m_{C\parallel}/m_{C\perp} = 1.2$ для $(\text{InAs})_2^{\text{напр}}(\text{GaAs})_2^{\text{напр}}$. Для вершины валентной зоны имеет место значительная анизотропия эффективных масс: $m_{V\parallel}/m_{V\perp} = 13$ для $(\text{InAs})_2^{\text{напр}}(\text{GaAs})_2$ и $m_{V\parallel}/m_{V\perp} = 11$ для $(\text{InAs})_2^{\text{напр}}(\text{GaAs})_2^{\text{напр}}$. Вывод о том, что перенос заряда в плоскости слоев напряженных СР осуществляется легкими дырками, а вдоль оси СР — тяжелыми, делался ранее в ряде работ [1, 7].

На первом этапе вычисление энергетического зонного спектра CP (InAs)₄(GaAs)₄ проводилось без учета спин-орбитального взаимодействия. При этом волновая функция разлагалась в ряд из ~360 плоских волн. Расчет привел к качественно различающимся результатам для структуры вершины валентной зоны (InAs)₄^{валп}(GaAs)₄^{валп} и (InAs)₄^{валп}(GaAs)₄. Именно для CP (InAs)₄^{валп}(GaAs)₄^{валп} три первых уровня в вершине валентной зоны оказались подобными уровням V₁, V₂, V₃ CP (InAs)₂(GaAs)₂. Ниже этих уровней по энергиям на расстояниях ≥ 0.4 эВ оказались уровни V₄, V₅, V₆, V₇, занимающие энергетический интервал ~0.1 эВ и произошедшие из точек (00λ) сфалерита. В CP (InAs)₄^{валп}(GaAs)₄^{валп} из-за сильной деформированности InAs наблюдались сближение и перекры-

Поляризационная зависимость дипольных оптических переходов из уровней валентной зоны на дно зоны проводимости CP (InAs)_n(GaAs)_n

Переходы	(InAs) ₂ ^{валп} (GaAs) ₂		(InAs) ₂ ^{валп} (GaAs) ₂ ^{валп}	
	энергия, эВ	J /J _⊥	энергия, эВ	J /J _⊥
V ₁ → C ₁	0.48	0	0.70	0
V ₂ → C ₁	0.68	0.43	0.78	2.2
V ₃ → C ₁	1.19	12	1.14	1.8

Табл. (продолжение)

Переходы	(InAs) ₄ ^{валп} (GaAs) ₄		(InAs) ₄ ^{валп} (GaAs) ₄ ^{валп}	
	энергия, эВ	J /J _⊥	энергия, эВ	J /J _⊥
V ₁ → C ₁	0.52	0	0.54	0
V ₂ → C ₁	0.68	0.21	0.61	1.8
V ₃ → C ₁	0.99	*	0.88	2.1
V ₄ → C ₁	1.0	*	1.07	*
V ₅ → C ₁	1.1	39	1.11	*
V ₆ → C ₁	1.1	*	1.24	*
V ₇ → C ₁	1.2	10	1.30	*

Примечание. * Вероятности переходов для параллельной и перпендикулярной поляризаций близки к нулю, из-за того что переходы V → C₁ аналогичны переходам Δ(00λ) → Γ(000) в сфалерите.

вание уровней, произошедших из точки Γ и точек (00λ) сфалерита, так что в итоге вблизи вершины валентной зоны сгруппировалось в энергетическом интервале ~0.5 эВ семь подзон («мини-зон» в терминах теории CP).

В обоих вариантах CP (InAs)₄(GaAs)₄ остальные уровни в глубине валентной зоны и выше дна зоны проводимости расположены на расстояниях ≥ 0.7 эВ, поэтому при учете спин-орбитального взаимодействия в CP (InAs)₄(GaAs)₄ определитель составлялся для семи уровней валентной зоны и одного уровня зоны проводимости.

Как видно из таблицы, в CP (InAs)₄^{валп}(GaAs)₄^{валп} по сравнению с (InAs)₂^{валп}(GaAs)₂^{валп} произошло уменьшение ширины запрещенной зоны. Поляризационные зависимости оптических дипольных переходов V₁₋₃ → C₁ и переходов V₁₋₃ → C₁ в CP (InAs)₂(GaAs)₂ оказались аналогичными. Вероятности переходов V₄₋₇ → C₁ для параллельной и перпендикулярной поляризаций оказались близкими к нулю, из-за того что эти переходы аналогичны переходам Δ(00λ) → Γ(000) в сфалерите. В случае CP (InAs)₄^{валп}(GaAs)₄^{валп} уровни V₁ и V₂ произошли в основном из точки Γ сфалерита, V₃, V₄, V₆ — из точки Δ(00λ); уровни V₅, V₇ отвечают сильно провзаимодействовавшим уровням из точек Γ и Δ сфалерита. Переходы V_{2, 3} → C₁, как правило, проявляются при поляри-

зации света, перпендикулярной оси роста СР, в то время как переходы $V_{5,7} \rightarrow C_1$ — при параллельной. Вероятности переходов $V_{3,4,6} \rightarrow C_1$ оказались близкими к нулю, из-за того что они аналогичны переходам $\Delta (00\lambda) \rightarrow \Gamma (000)$ в сфалерите.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Osbourn G. C. // J. Vac. Sci. Techn. B. 1986. V. 4. N 6. P. 1423—1426.
- [2] Izu T., Tiang De-Sheng, Ploog K. // Appl. Phys. A. 1987. V. 43. N 1. P. 75—79.
- [3] Ковалев О. В. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления деформированных групп. М., 1986. 367 с.
- [4] Хейне В., Козн М., Уэйр Д. Теория псевдопотенциала. М., 1973. 557 с.
- [5] Cardona M., Christensen N. E. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 12. P. 6182—6194.
- [6] Weisz G. // Phys. Rev. 1966. V. 149. N 2. P. 504—518.
- [7] Dahl D. A. // Sol. St. Commun. 1987. V. 61. N 12. P. 825—826.

Кемеровский
государственный
университет

Получена 25.01.1989
Принята к печати 9.03.1989