

РАСЧЕТЫ ВЕРОЯТНОСТЕЙ ИЗЛУЧАТЕЛЬНЫХ ПЕРЕХОДОВ И ВРЕМЕН ЖИЗНИ В КВАНТОВО-РАЗМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ

Соколова З. Н., Халфин В. Б.

Рассмотрено влияние сложной структуры валентной зоны на скорость излучательной рекомбинации в гетероструктурах с квантовыми ямами (КЯ) на соединениях $A^{III}B^V$. Исследованы разные модели как с бесконечно глубокими КЯ, так и с КЯ конечной глубины для электронов и дырок. Для «дырочной» КЯ бесконечной глубины рассчитаны энергетические спектры и матричные элементы оптических переходов между состояниями в зоне проводимости и валентной зоне (как «разрешенные», так и «запрещенные»), на основе чего определены зависимости излучательных времен жизни от толщины КЯ (d). Установлено, что при $d \geq 75 \text{ \AA}$ все модели, учитывающие и не учитывающие сложную структуру валентной зоны, дают результаты, близкие к чисто объемным значениям времен жизни. При меньших толщинах в модели простой зоны время жизни перестает зависеть от d , что соответствует двумерному пределу. Для сложной же зоны в интервале $30\text{--}75 \text{ \AA}$ время жизни падает с уменьшением d , имитируя трехмерное поведение, что объясняется особенностями энергетического спектра нижних уровней размерного квантования дырок в сложной валентной зоне.

В последнее время большое внимание уделяется исследованию оптических свойств квантово-размерных структур на основе полупроводников $A^{III}B^V$ [1-3]. Для теоретического исследования излучательной рекомбинации в таких структурах необходимо знать энергетические спектры электронов и дырок и матричные элементы оптических переходов между размерно-квантованными состояниями в зоне проводимости и валентной зоне. Указанные характеристики неоднократно вычислялись в различных предположениях об энергетическом спектре квантовых ям (КЯ) [2-6]. Однако, насколько нам известно, систематического сравнения различных моделей до сих пор проведено не было и не исследовалась зависимость излучательных характеристик от толщины КЯ.

В настоящей работе выполнено сравнение нескольких моделей для расчета вероятностей излучательных переходов и времен жизни носителей в КЯ при комнатной температуре. Рассматривались модели, в которых излучательные переходы происходят с сохранением квазимпульса. В простейшей модели 1 полностью пренебрегалось размерным квантованием. В модели 2 учитывалось размерное квантование в КЯ конечной глубины, но валентная зона рассматривалась как совокупность не взаимодействующих изотропных параболических подзон тяжелых и легких дырок. В модели 3 предполагалось, что электроны и дырки находятся в бесконечно глубоких потенциальных ямах, но учитывалась сложная структура валентной зоны, в которой происходит перемешивание тяжелых и легких дырок при отражении от границ КЯ. В этой модели при $k \rightarrow 0$ (k — продольный волновой вектор, лежащий в плоскости слоев) выполняется строгое правило отбора $\Delta n = 0$ [$n = 1, 2, 3 \dots$ — номера подзон размерного квантования (ПРК), участвующих в переходах]. Однако при $k \neq 0$ это правило нарушается и вероятности «разрешенных» и «запрещенных» по n переходов становятся одного порядка, и как те, так и другие переходы проявляются в спектрах излучения и поглощения [4].

Модель 4 подобна модели 3, но глубина КЯ для электронов считалась конечной. Расчеты в моделях 1 и 2 выполнены в предшествующих работах [3, 5]. В настоящей статье подробно остановимся на моделях 3 и 4. Энергетический спектр дырок рассчитывался с помощью гамильтониана Латтинжера в сферическом приближении, так как, по нашим оценкам, связь между концентрацией дырок и уровнем Ферми, а также времена излучательных переходов изменятся слабо при учете анизотропии.

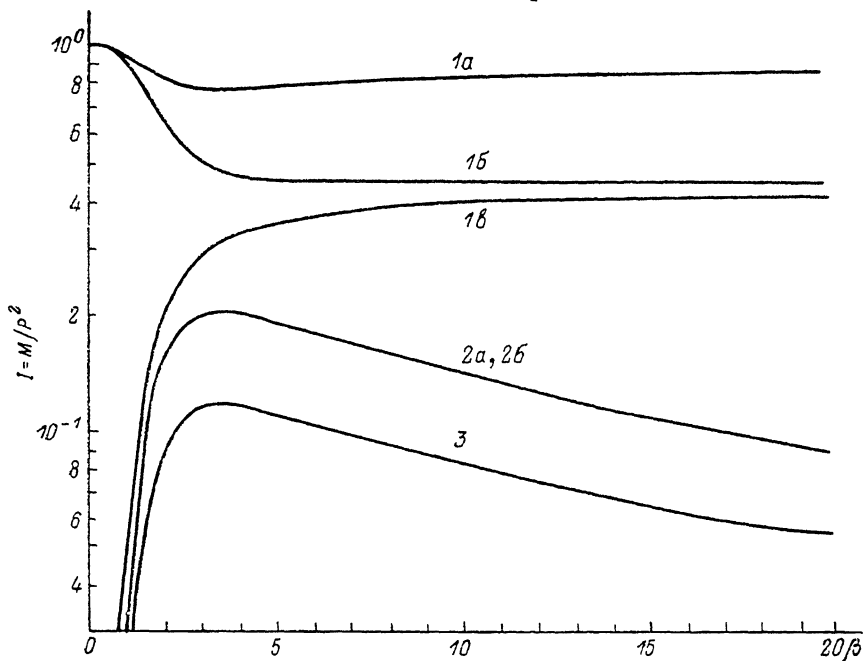


Рис. 1. Зависимости величин интегралов перекрытия от безразмерной толщины квантовой ямы для переходов между различными подзонами размерного квантования, вычисленные в моделях 3 (1, 2) и 4 для $d=75 \text{ \AA}$, $\Delta E_c=240 \text{ мэВ}$ (3).

$a - I = I_{TE} + I_{TM}$, $b - I_{TE}$, $c - I_{TM}$. $1 - (1h - 1c)$, $2, 3 - (1h - 2c)$.

Волновые функции дырок в валентной зоне Ψ_h представлялись в виде разложения по спинорным волновым функциям легких и тяжелых дырок, отвечающих дну валентной зоны [7]:

$$\Psi_h(n, k) = \sum_{i\alpha} C_{i\alpha}(n, k, z) |X_i\rangle S_\alpha e^{ikz}, \quad (1)$$

где n — номер ПРК дырок; z — координата, перпендикулярная плоскости слоя. Координатные функции X_i преобразуются как соответствующие координаты x, y, z ; S_α — спиновые функции. Дисперсионное соотношение, определяющее энергию дырок E как функцию продольного волнового вектора k , и коэффициенты разложения $C_{i\alpha}$ ($i=1-3, \alpha=1, 2$) находились из условия равенства нулю волновой функции (1) на границах ямы.

Использовалось дипольное приближение, в котором вероятность излучательного перехода пропорциональна квадрату матричного элемента импульса между волновыми функциями зоны проводимости (Ψ_c) и валентной зоны (Ψ_h). Квадрат матричного элемента (M) оператора импульса (\hat{p}) выражался через интегралы перекрытия (ИП) $I_{i\alpha}(n, k, m)$:

$$M = |\langle \Psi_h | \hat{p} | \Psi_c \rangle|^2 = \sum_i M_i = P^2 \sum_{i\alpha} |I_{i\alpha}(n, k, m)|^2, \quad (2)$$

где

$$I_{i\alpha}(n, k, m) = A_m \int_{-d/2}^{d/2} C_{i\alpha}(n, k, z) \begin{Bmatrix} \sin \\ \cos \end{Bmatrix} (k_z z) dz,$$

A_m — нормировочный множитель электронной волновой функции, m — номер ПРК электронов, P — кейновский матричный элемент импульса, k_e — поперечный волновой вектор электрона, $\begin{Bmatrix} \sin \\ \cos \end{Bmatrix}(k_e z)$ — огибающая волновой функции электрона.

Вследствие зеркальной симметрии энергетические уровни дырок, так же как и электронов, двукратно вырождены. Поэтому в вероятность излучательных переходов входит не зависящая от спинового индекса сумма (M) квадратов матричных элементов, отвечающая двум вырожденным дырочным волновым функциям. Отметим, что величина $M_{TE} = M_X + M_Y$ ответственна за излучение TE -поляризации, а $M_{TM} = M_Z$ — за излучение TM -поляризации. Ве-

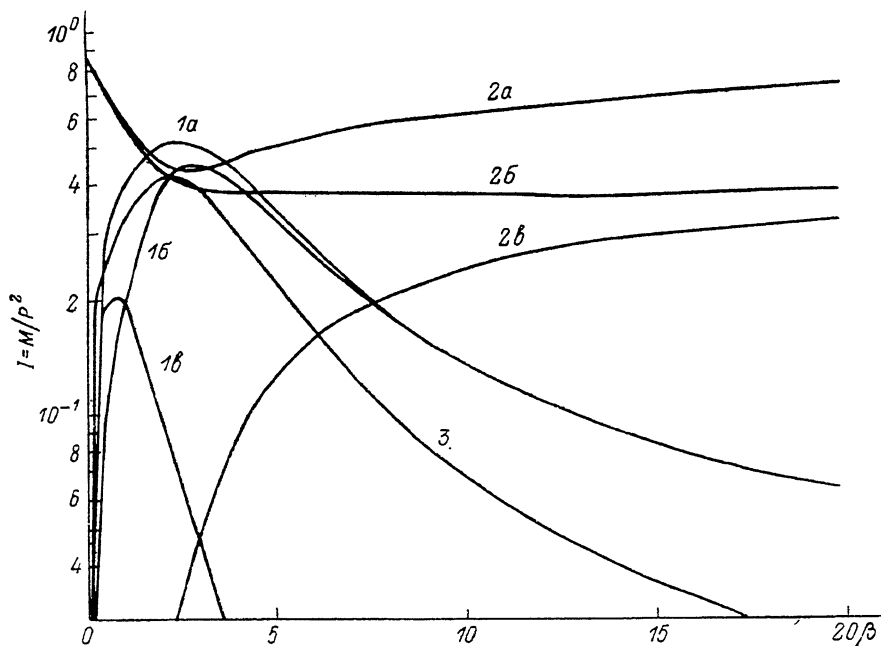


Рис. 2.

То же, что и на рис. 1. 1, 3 — $(2h-1c)$, 2 — $(2h-2c)$.

личины M_X , M_Y , M_Z пропорциональны интенсивности излучения соответствующих дипольных моментов, а их сумма $M = M_{TE} + M_{TM}$ пропорциональна полной вероятности излучательного перехода. Энергетический спектр, интегралы перекрытия и матричные элементы излучательных переходов вычислялись на ЭВМ.

На рис. 1—3 представлены зависимости ИП $I = M/P^2 = f(\beta)$, $\beta = (kd/2)^2$ для гетероструктур $Al_{0.32}Ga_{0.68}As/GaAs$. На рис. 1 приведены ИП для переходов между первой ПРК тяжелых дырок ($1h$) и первой ($1c$) (кривые 1) и второй ($2c$) (кривая 2) ПРК электронов, вычисленные в модели 3. При $\beta = 0$ выполняется строгое правило отбора $n = m$ (такие переходы назовем «разрешенными», остальные — «запрещенными»). Для разрешенного перехода ($1h-1c$) отлична от нуля только компонента излучения TE -поляризации (кривая $1b$). При $\beta \neq 0$ в разрешенных переходах проявляются обе компоненты (TE и TM) (кривые $1b$ и $1c$); для перехода ($1h-1c$) их интенсивности довольно быстро сравниваются. Так, при $\beta \approx 3$ $I_{TE}/I_{TM} \approx 1.7$. Отметим, что полный ИП для перехода ($1h-1c$) при любых β мало отличается от единицы (кривая $1a$). Вероятность запрещенного перехода ($1h-2c$) имеет максимум, равный 0.2 также при $\beta \approx 3$.

На рис. 2 представлены ИП для переходов между ($2h$) и электронными ПРК ($1c$) и ($2c$) в той же модели. Для разрешенного перехода ($2h-2c$) I падает до значения 0.45 при $\beta \approx 2.5$ (кривая $2a$). ИП для запрещенного перехода

$(2h-1c)$ быстро нарастает от нуля при $k=0$ до 0.5 при $\beta=2.5$ (кривая 1a). Высокая вероятность запрещенного перехода $(2h-1c)$ связана с сильным взаимодействием ПРК $(2h)$ и $(1l)$ [8]. Из рис. 2 видно, что ИП запрещенного перехода $(2h-1c)$ сравнивается с ИП разрешенного перехода $(2h-2c)$ в интервале $\beta=1.5-3.5$, что для КЯ шириной $d=100 \text{ \AA}$ соответствует энергии дырок $E_h=36-53 \text{ мэВ}$, а для КЯ с $d=200 \text{ \AA}$ $E_h=9-13 \text{ мэВ}$. Следовательно, при комнатной температуре запрещенные оптические переходы должны наблюдаться невырожденными. В структурах с $d < 100 \text{ \AA}$ для наблюдения запрещенных переходов необходимы высокие уровни накачки, отвечающие концентрации электронов и дырок, большей 10^{12} см^{-2} .

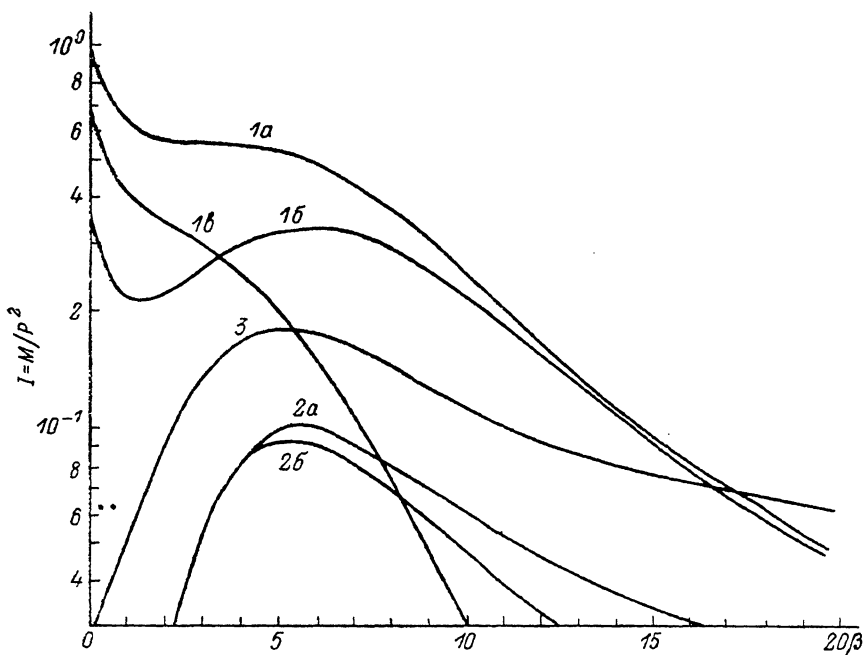


Рис. 3.

То же, что и на рис. 1. 1 — $(1l-1c)$, 2, 3 — $(3h-1c)$.

На рис. 3 представлены ИП ПРК $(1c)$ с первой ПРК легких дырок $(1l)$ и третьей ПРК тяжелых дырок $(3h)$ в модели 3. При $\beta=0$ у разрешенного перехода $(1l-1c)$ преобладает TM -поляризация (кривая 1e), что согласуется с [9]. При возрастании β величина I_{TM} быстро уменьшается, а при $\beta \geq 3.5$ I_{TE} начинает превосходить I_{TM} . Вероятность запрещенного перехода $(3h-1c)$ (кривые 2) достаточно мала.

$d, \text{ \AA}$	γ	Переходы					
		I			II		
		$1h-1c$	$1l-1c$	$2h-2c$	$1h-1c$	$1l-1c$	$2h-2c$
200	0.06	0.976	0.976	0.922	0.994	1	0.977
150	0.11	0.961	0.961	0.866	0.989	1	0.957
100	0.24	0.922	0.922	0.722	0.977	0.999	0.897
75	0.42	0.877	0.877	0.535	0.964	0.998	0.784
50	0.94	0.771	0.771	—	0.932	0.997	—
30	2.62	0.572	0.572	—	0.859	0.994	—
$\Delta E_c = \infty$	0	1	1	1	1	1	1

Примечание. Значения ИП ($I = I_{TE} + I_{TM}$) для «разрешенных» переходов при $\beta=0$; I — модель 4; II — $\Delta E_c = 240$, $\Delta E_v = 160 \text{ мэВ}$. Во всех расчетах использованы следующие значения эффективных масс: электронов — $m_e = 0.067 m_0$, тяжелых и легких дырок — $m_h = 0.45 m_0$ и $m_l = 0.08 m_0$.

Вычисления в модели 4 проводились применительно к структуре $\text{Al}_{0,32}\text{Ga}_{0,68}\text{As}/\text{GaAs}$. Считалось, что глубина электронной КЯ $\Delta E_c = 240$ мэВ. Расчеты показывают, что переход к конечной глубине электронной КЯ приводит к почти пропорциональному изменению ИП при всех значениях продольного волнового вектора для разрешенных переходов с точностью до 10 % (как для TE -, так и для TM -поляризаций). Поэтому в таблице приведены значения ИП (I) для разрешенных переходов только при $\beta=0$ в зависимости от безразмерного параметра $\gamma = \hbar^2 \pi^2 / (2m_c d^2 \Delta E_c)$, m_c — эффективная масса электрона. Для запрещенных переходов такой пропорциональности, вообще говоря, не наблюдается. Поэтому на рис. 1—3 приведены зависимости $I=f(\beta)$ для запрещенных переходов при $d=75 \text{ \AA}$ (кривые 3). Из рис. 3 видно, что ИП перехода ($3h-1c$) в конечной КЯ больше, чем в бесконечной, так как в конечной КЯ этот переход разрешен уже при $\beta=0$.

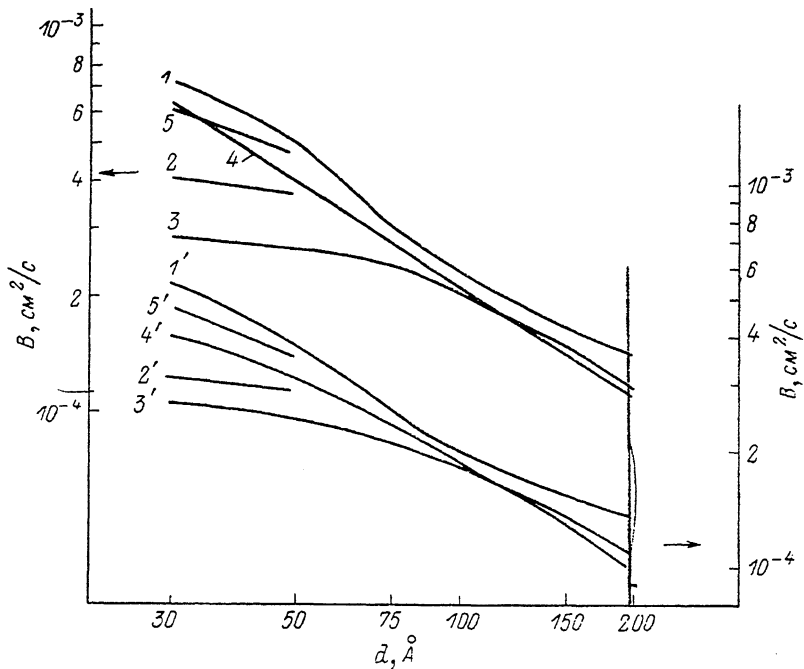


Рис. 4. Зависимости коэффициента излучательной рекомбинации B от толщины квантовой ямы d , рассчитанные при фиксированной поверхностной концентрации.

$n, \text{см}^{-2}$: 1—4 — 10^{11} (левая шкала), 1'—4' — 10^{12} (правая шкала). Модели: 1, 1' — 1; 2, 2' — 2; 3, 3' — 3; 4, 4' — 4; 5, 5' — в тексте.

Далее с использованием полученных матричных элементов оптических переходов вычислялась скорость межзонной излучательной рекомбинации

$$G = 2w / (2\pi)^2 \sum_{n, m} M_{nm} f_c(k) f_v(k) d^2 k, \quad (3)$$

n, m — номера ПРК дырок и электронов, f_c, f_v — функции распределения электронов и дырок, w — вероятность излучательного перехода электрона в свободное дырочное состояние, вычисленная, как в [10]:

$$w = \frac{2}{3} \frac{e^2}{\hbar^2 c^3} \frac{E_g^2 \sqrt{\epsilon_\infty}}{m_c}, \quad (4)$$

ϵ_∞ — оптическая диэлектрическая проницаемость, E_g — ширина запрещенной зоны в КЯ. Использовано приближение Кейна для межзонного матричного элемента.

Рассматривался случай равной концентрации электронов и дырок ($n=p$). Зависимости коэффициента излучательной рекомбинации B [$G=Bn^2$; излучательное время жизни $\tau=(Bn)^{-1}$] от толщины КЯ приведены на рис. 4. Кри-

вые 1, 1' соответствуют трехмерным расчетам (модель 1), 2, 2' получены в модели простой валентной зоны 2 для структуры $\text{Al}_{0.32}\text{Ga}_{0.68}\text{As}/\text{GaAs}$ ($\Delta E_c = 240$, $\Delta E_v = 160$ мэВ). Кривые 3, 3' — результаты расчета в модели сложной зоны 3; отрезки 4, 4' — в модели 4.

Из рис. 4 видно, что при $d > 75 \text{ \AA}$ результаты практически не зависят от модели. При меньших толщинах модель 1 дает зависимость $B \sim d^{-1}$, так как скорость рекомбинации вычислялась при фиксированной поверхностной концентрации n , что отвечает с уменьшением d росту объемной концентрации $n_v = n/d$. В модели 2 при малых d коэффициент B слабо зависит от d , что и следует ожидать при переходе к двумерному пределу. Несколько неожиданно то, что модель 3 не приводит к насыщению $B = f(d)$ при малых d , несмотря на ее двумерный характер. Это связано с особенностями закона дисперсии нижнего УРК дырок ($1\hbar$) [8]. При $\beta = 0$ продольная эффективная масса этого УРК мала, но довольно быстро при увеличении β приближается к массе тяжелых дырок, поэтому приведенная плотность состояний в данной подзоне (N_s) с уменьшением d падает (N_s — эффективная плотность состояний, усредненная в энергетическом интервале шириной kT). Концентрация носителей связана с N_s соотношением $p = N_s \exp(-\zeta_h/kT)$, где ζ_h — квазиуровень Ферми дырок, отсчитываемый от края зоны. Поэтому при уменьшении d и фиксированной концентрации p величина ζ_h также уменьшается и функция заполнения дырок при $\beta = 0$, равная $\exp(-\zeta_h/kT)$, растет. В силу закона сохранения квазимультиплекса и малой эффективной массы электронов наибольший вклад в рекомбинацию дает окрестность точки $\beta = 0$, поэтому уменьшение d в диапазоне 75—30 \AA приводит к росту величины B . Насыщение при таком законе дисперсии должно наблюдаться при еще меньших значениях d . Эти расчеты не проводились, поскольку при таких d и модель бесконечной КЯ, и само приближение эффективной массы теряют физический смысл.

Конечность глубины КЯ электронов сказывается на значении коэффициента B в основном через изменения ИП, поэтому существенное различие между моделями 3 и 4 возникает только при $d \leq 50 \text{ \AA}$ [см. таблицу и рис. 4 (кривые 1, 1' и 2, 2')]. В модели 4 величина ИП недооценивалась, так как из-за бесконечной глубины КЯ дырок не учитывалось проникновение волновой функции за пределы КЯ. Значения ИП при $\beta = 0$ для модели с двумя конечными КЯ приведены в таблице (серия II). Более точную оценку коэффициента B можно получить, умножив значения B в модели 3 на указанные значения ИП для перехода ($1\hbar - 1c$) из таблицы (рис. 4, кривые 5, 5'). Следует отметить, что параллельность 2 и 4, а также 2' и 4' на рис. 4 носит случайный характер, так как в модели 4 уменьшение ИП по сравнению с моделью 3 компенсирует возрастание B из-за особенности дырочного энергетического спектра.

Таким образом, приведенные расчеты коэффициента B показывают, что при толщине КЯ $d > 75 \text{ \AA}$ квантово-размерные эффекты слабо влияют на скорость излучательной рекомбинации. Хотя при учете сложной структуры валентной зоны появляется вклад в рекомбинацию от запрещенных переходов, соответственно уменьшаются ИП для разрешенных переходов. Поэтому полная скорость рекомбинации изменяется мало. При $d < 75 \text{ \AA}$ необходимо учитывать как размерное квантование, так и сложную структуру валентной зоны. Отметим, что вследствие сложной структуры валентной зоны предел скорости излучательной рекомбинации [5] не достигается при разумных значениях толщины КЯ. При $d < 75 \text{ \AA}$ B продолжает расти с уменьшением d , имитируя трехмерное поведение.

Список литературы

- [1] Гарбузов Д. З., Халфин В. Б. // Тез. докл. Советско-Американского симп. «Лазерная оптика конденсированных сред». Л., 1987. С. 6.
- [2] Colak S., Eppenga R., Schuurmans M. // IEEE J. Quant. Electron. 1987. V. QE-23. N 6. P. 960—968.
- [3] Гарбузов Д. З., Тихунов А. В., Халфин В. Б. // ФТП. 1987. Т. 21. В. 6. С. 1085—1094.
- [4] Yu R. W., Sanders G. D., Reynolds D. C. et al. // Phys. Rev. 1987. V. B35. N 17. P. 9250—9258.
- [5] Халфин В. Б., Гарбузов Д. З., Красовский В. В. // ФТП. 1986. Т. 20. В. 10. С. 1816—1822.

- [6] Sanders G. D., Chang Y. C. // J. Vac. Sci. Techn. B. 1985. V. 3. N 4. P. 1285—1289.
- [7] Бир Г. Л., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М., 1972. 640 с.
- [8] Соколова З. Н., Халфин В. Б., Эфрос Ал. Л. // ФТП. 1988. Т. 22. В. 12. С. 2124—2130.
- [9] Захарченя Б. П., Мирлин Д. Н., Перель В. И., Решина И. И. // УФН. 1982. Т. 136. В. 3. С. 459—499.
- [10] Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Релятивистская квантовая теория. Ч. I. М., 1968. 430 с.

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

Получена 18.04.1989
Принята к печати 29.05.1989
