

ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СОЕДИНЕНИЯХ $A^{III}B^V$ p -ТИПА

Лаврушин Б. М., Набиев Р. Ф., Попов Ю. М.

Методами теории многих частиц рассчитаны спектры оптического поглощения в полупроводниковых соединениях GaSb, InAs, в которых величина спин-орбитального отщепления близка к ширине запрещенной зоны. Рассмотрены переходы между подзонами валентной зоны и фундаментальное поглощение. Проведено сравнение с экспериментальными данными по поглощению в GaSb p -типа при 80 и 300 К. Получено удовлетворительное согласие теоретических и экспериментальных результатов вблизи фундаментального края поглощения.

1. Полупроводниковые соединения $A^{III}B^V$ широко используются в качестве активной области полупроводниковых лазеров инфракрасного диапазона спектра. В условиях внешнего возбуждения или легирования акцепторами, когда в валентной зоне есть дырки, возможны оптические переходы между $S-H$ -, $S-L$ - и $L-H$ -подзонами валентной зоны (S — спин-отщепленная подзона, L и H — подзоны легких и тяжелых дырок). Такие переходы характерны для полупроводников с кристаллической структурой алмаза (Ge и Si) и цинковой обманки ($A^{III}B^V$) и экспериментально наблюдались в Ge [1], Si [2], в большинстве соединений $A^{III}B^V$: GaAs [3], AlSb [4], InSb [5], GaP [6], GaSb [7]. В [8] было показано, что такое поглощение может оказывать сильное влияние на температурные характеристики работы InGaAsP/InP- и GaAlSbAs/GaSb-лазеров. В [9] было показано, что между $S-H$ -поглощением и оже-рекомбинацией неравновесных носителей заряда в полупроводниках p -типа существует тесная связь. Недавно были получены новые данные по поглощению в GaSb p -типа [10].

В данной работе представлены теоретические расчеты спектров поглощения в полупроводниковых соединениях GaSb и InAs p -типа и сравнение с экспериментальными результатами работы [10].

2. Коэффициент поглощения при переходе из зоны 1 в зону 2 определяется соотношением [11]

$$\alpha_{12}(\omega) = \frac{e^2}{m_0^2 c \pi \hbar^3 \omega \pi^2} \int k^2 dk |P_{12}(k)|^2 \int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 A^{(1)}(k, \varepsilon_1) A^{(2)}(-k, \varepsilon_2) \times \\ \times [f(\varepsilon_1) - f(\varepsilon_2)] \delta(\varepsilon_1 + \hbar\omega - \varepsilon_2), \quad (1)$$

где m_0 — масса свободного электрона, c — скорость света в вакууме, α — коэффициент преломления, f — функция распределения частиц,

$$A(k, \varepsilon) = 2 \frac{\Gamma(k, \varepsilon)}{|\varepsilon - T(k)|^2 + \Gamma^2(k, \varepsilon)} \quad (2)$$

— спектральная функция [12], $\Gamma(k, \varepsilon)$ — мнимая часть собственно энергетической части функции Грина, $T(k)$ — кинетическая энергия частицы, P_{12} — матричный элемент перехода между состояниями 1 и 2, взятый по блоховским функциям.

На рис. 1 представлены зонные диаграммы и возможные оптические переходы при 300 К в зонной модели Кейна [13]. Матричные элементы перехода $|P_{12}|^2$ определяются соотношением [13]

$$|P_{12}|^2 = \frac{2m_0^3 P^2}{3\hbar^2} [(a_1 c_2 + c_1 a_2)^2 + (a_1 b_2 - b_1 a_2)^2], \quad (3)$$

где a_i, b_i, c_i — коэффициенты разложения блоховских функций в подзонах по базисным функциям,

$$P^2 = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_e} - \frac{1}{m_0} \right) (E_g + \Delta) E_g \left(E_g + \frac{2\Delta}{3} \right)^{-1},$$

Δ — величина спин-орбитального отщепления при $k=0$. Из рис. 1 ясно, что вблизи фундаментального края поглощения, где $\hbar\omega \approx E_g$, вклад в поглощение вносят только переходы $S-H$ (переходы $L-H$ не проходят по энергетическому положению подзон L и H , а $S-L$ — из-за малой плотности заполненных состояний в подзоне легких дырок). В дальнейшем поэтому будем рассматривать только $S-H$ -поглощение.

В случае $S-H$ -перехода формула (1) преобразуется в

$$\alpha_{SH}(\omega) = \frac{4e^2}{\pi^2 m_0^2 c \hbar^3 \omega} \int k^2 dk |P_{SH}(k)|^2 \int d\varepsilon \frac{\Gamma^{\hbar}(k, \varepsilon) f^{\hbar}(\varepsilon)}{(\varepsilon - \hbar^2 k^2 / 2m_h)^2 + \Gamma^{\hbar^2}(k, \varepsilon)} \times \frac{\Gamma^s(k, \hbar\omega - \Delta + \varepsilon)}{(\hbar\omega - \Delta + \varepsilon - \hbar^2 k^2 / 2m_s)^2 + \Gamma^{s^2}(k, \hbar\omega - \Delta + \varepsilon)}, \quad (4)$$

где m_h, m_s — массы тяжелой и спин-отщепленной дырок.

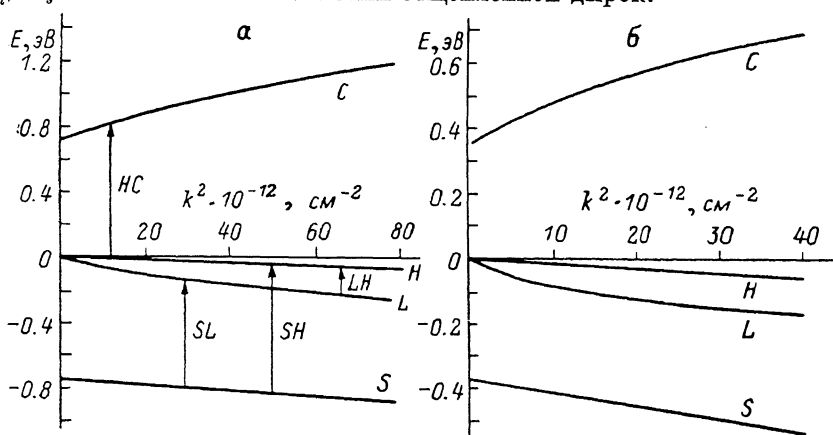


Рис. 1. Зонная структура GaSb (а) и InAs (б) в модели Кейна [13].

Буквами C, H, L, S показаны зоны проводимости и подзоны тяжелых, легких и спин-отщепленных дырок соответственно. Стрелками показаны возможные переходы, участвующие в оптическом поглощении.

В работе [9] при расчете коэффициента поглощения считалось, что $\Gamma^s(k, \varepsilon) = 0$, т. е. не учитывалось рассеяние дырок в спин-отщепленной зоне. Это справедливо, если рассматривать рассеяние только внутри спин-отщепленной зоны. Но вероятность рассеяния S -дырок с переходом в подзону тяжелых дырок намного выше и сравнима с вероятностью рассеяния тяжелых дырок. Поэтому для правильного расчета $\alpha(\omega)$ необходимо использовать точную формулу (4).

При рассеянии электронов в зоне проводимости можно считать, что $\Gamma^c(k, \varepsilon) = 0$, так как $m_e \ll m_h$, при этом $A^c(k, \varepsilon) = 2\pi\delta(\varepsilon - E_g - \hbar^2 k^2 / 2m_s)$, поэтому при переходе зона тяжелых дырок — зона проводимости ($H-C$) коэффициент поглощения определяется соотношением

$$\alpha_{HC}(\omega) = \frac{2e^2}{\pi m_0^2 c \hbar^3 \omega} \int k^2 dk |P_{CH}(k)|^2 A^{\hbar}[k, \hbar\omega - T_e(k)] [1 - f^{\hbar}(\hbar\omega - T_e(k))],$$

где

$$A^{\hbar}[k, \omega - T_e(k)] = 2 \frac{\Gamma^{\hbar}(k, \hbar\omega - E_g - \hbar^2 k^2 / 2m_e)}{(\hbar\omega - E_g - \hbar^2 k^2 / 2m_e - \hbar^2 k^2 / 2m_h)^2 + \Gamma^{\hbar^2}(k, \hbar\omega - E_g - \hbar^2 k^2 / 2m_e)}, \quad (5)$$

$$P_{CH} = \frac{2m_0^2 P^2}{3\hbar^2}, \quad f^{\hbar}(\varepsilon) = \left[\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_h}{kT}\right) + 1 \right]^{-1},$$

μ_h — уровень Ферми для дырок.

3. Затухание $\Gamma(k, \varepsilon)$ в низшем порядке теории возмущения по электрон-фононному взаимодействию равно [12]

$$\Gamma(k, \varepsilon) = \pi \sum_{\mathbf{q}, \nu} |A_\nu(\mathbf{q})|^2 \{ [1 - f(k - \mathbf{q}) + P(\mathbf{q})] \delta[\varepsilon - T(k - \mathbf{q}) - \Omega(\mathbf{q})] + [f(k - \mathbf{q}) + P(\mathbf{q})] \delta[\varepsilon - T(k - \mathbf{q}) + \Omega(\mathbf{q})] \}, \quad (6)$$

где $\Omega(\mathbf{q})$ — частота фонона, $\Omega(\mathbf{q}) = \Omega_0$ для оптических фононов, $\Omega(\mathbf{q}) = sq$ для акустических фононов (s — скорость звука), $P(\mathbf{q}) = [\exp(\hbar\Omega/kT) - 1]^{-1}$ — число заполнения фононов, $A_\nu(\mathbf{q})$ — вершинная часть электрон-фононного взаимодействия:

$$\begin{aligned} |A_1(\mathbf{q})|^2 &= \frac{2\pi e^2 \Omega_0}{\varepsilon^* q^2}, \quad \frac{1}{\varepsilon^*} = \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0}, \\ |A_2(\mathbf{q})|^2 &= \frac{E_{NPO}^2 \Omega_0}{2c}, \\ |A_3(\mathbf{q})|^2 &= \frac{\Xi^2 sq}{2c_l}, \\ |A_4(\mathbf{q})|^2 &= \frac{P_{PE}^2 e^2 sq}{2q^2}, \end{aligned} \quad (7)$$

где первое и второе соотношения относятся к полярному и неполярному взаимодействиям с оптическими фононами, а третье и четвертое — к деформационному и пьезоэлектрическому взаимодействиям с акустическими фононами. Вычислив затухание (6) с вершинными частями (7), получим

$$\Gamma^h(k, \varepsilon) = \Gamma^s(k, \varepsilon) = \Gamma_{PO}(k, \varepsilon) + \Gamma_{NPO}(k, \varepsilon) + \Gamma_{DA}(k, \varepsilon) + \Gamma_{PE}(k, \varepsilon), \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{PO}(k, \varepsilon) &= \frac{e^2 \Omega_0 m_h}{2\varepsilon^* \hbar^2 k} \left\{ [1 - f^h(\varepsilon - \hbar\Omega_0) + P(\Omega_0)] \times \right. \\ &\times \ln \left| \frac{k + k_1^-}{k - k_1^-} \right| + [f^h(\varepsilon + \hbar\Omega_0) + P(\Omega_0)] \ln \left| \frac{k + k_1^+}{k - k_1^+} \right| \left. \right\}, \end{aligned} \quad (8a)$$

$$\Gamma_{NPO}(k, \varepsilon) = \frac{E_{NPO}^2 \Omega_0 m_h}{4\pi c \hbar^2} \{ [1 - f^h(\varepsilon - \Omega_0) + P(\Omega_0)] k_1^- + [f^h(\varepsilon + \Omega_0) + P(\Omega_0)] k_1^+ \}, \quad (8б)$$

$$\Gamma_{DA}(k, \varepsilon) = \frac{\Xi^2 m_h}{24\pi c_l \hbar^2 k} \{ \hbar s [(k + k_2)^3 - |k - k_2|^3] + 12T k k_2 \}, \quad (8в)$$

$$\Gamma_{PE}(k, \varepsilon) = \frac{P_{PE}^2 m_h}{4\pi \hbar^2 k} \left\{ \hbar s \min(k, k_2) + T \ln \left| \frac{k + k_2}{k - k_2} \right| \right\}, \quad (8г)$$

$$k_1^\pm = \sqrt{2m(\varepsilon \pm \Omega_0)} \theta(\varepsilon \pm \Omega_0), \quad k_2 = \sqrt{2m\varepsilon}.$$

В выражении (8) для $\Gamma^s(k, \varepsilon) f^h = 0$, так как обычно $\Delta - \mu_h \gg T$.

4. Необходимые для расчетов поглощения значения параметров приведены в таблице. Для расчетов также необходимо знать смещение ширины запрещенной зоны E_g с ростом концентрации легирующей примеси. Мы использовали эмпирическое соотношение [14]

$$\Delta E_g, \text{ эВ} = 1.6 \cdot 10^{-13} (p, \text{ см}^{-3})^{-1/3}. \quad (9)$$

На рис. 2 представлены зависимости $\alpha(\omega) = \alpha_{SH}(\omega) + \alpha_{HC}(\omega)$ при 80 (а) и 300 К (б) для GaSb. Для сравнения приведены экспериментальные данные по поглощению в образцах GaSb p -типа [10] (рис. 2, в, г). Поведение теоретических и экспериментальных данных по $\alpha(\omega)$ хорошо согласуется, для количественного согласия необходимо теоретические данные умножить на фактор ≈ 2 . При этом количественное согласие вполне удовлетворительно. Появление этого множителя может быть связано с неточным определением в модели Кейна величины P^2 . Немонотонное поведение α от концентрации дырок p в диапазоне энергий фотона 800—850 мэВ при 80 К связано с конкуренцией $S-H$ - и $H-C$ -

каналов поглощения света. При $\hbar\omega > \Delta$ и $T=80$ К спектры $S-H$ -поглощения (штриховые линии) имеют максимум, который зависит от p . Одновременно наличие дырок с концентрацией p приводит к сужению запрещенной зоны ΔE_g и смещению края $H-C$ -поглощения в коротковолновую сторону из-за вырождения дырок (эффект Бурштейна—Мосса). Одновременное влияние этих эффектов приводит к изображенному на рис. 2, б поведению спектров $\alpha(\omega)$. Рассеяние тяжелых дырок приводит к существенному возрастанию $S-H$ -поглощения в области частот $\hbar\omega < \Delta$. При низких температурах (рис. 2, а) в спектрах

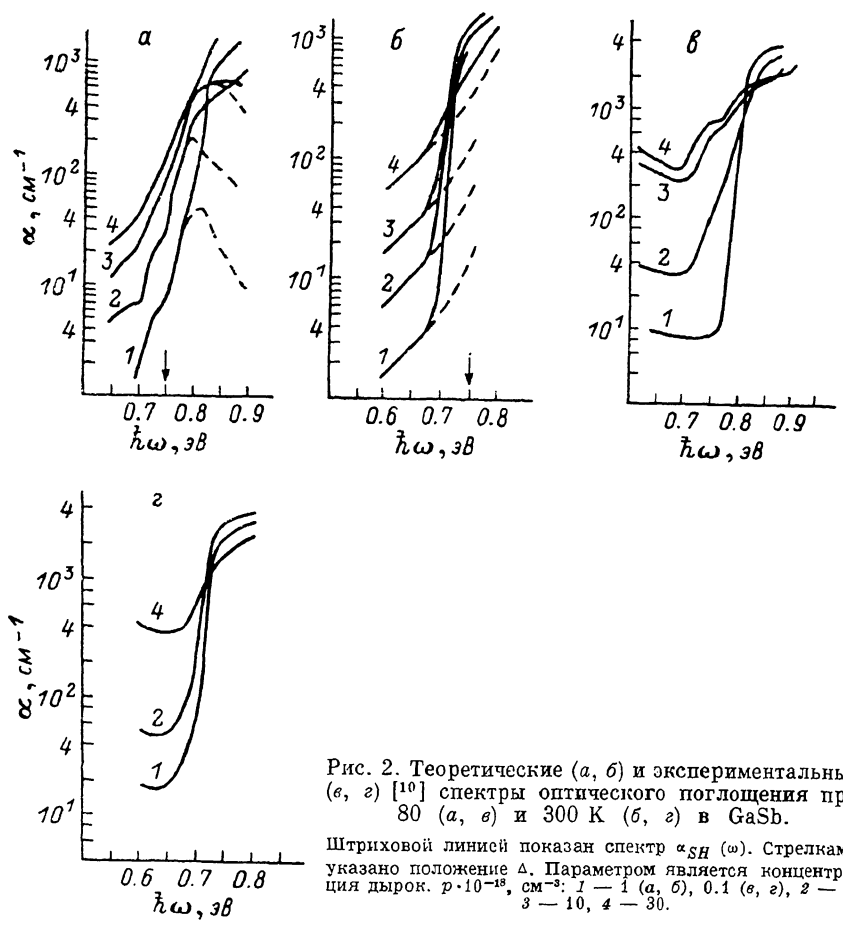


Рис. 2. Теоретические (а, б) и экспериментальные (в, г) [10] спектры оптического поглощения при 80 (а, в) и 300 К (б, г) в GaSb. Штриховой линией показан спектр $\alpha_{SH}(\omega)$. Стрелками указано положение Δ . Параметром является концентрация дырок. $p \cdot 10^{-18}$, см^{-3} : 1 — 1 (а, б), 0.1 (в, г), 2 — 4, 3 — 10, 4 — 30.

поглощения отчетливо видна фоновая структура хвоста поглощения, которая замыкается при повышении концентрации дырок (кривая 4) или при повышении температуры (рис. 2, б). Наибольший вклад в затухание дырочных состояний вносит полярное рассеяние на LO -фононах, остальные каналы рассеяния только сглаживают структуру фоновых повторений в спектрах $S-H$ -поглощения.

Возрастание поглощения α при малых частотах ω характерно для поглощения на свободных носителях [15]. Приведенные в книге [15] формулы позволяют оценить поглощение на свободных дырках. Максимальный вклад в сечение поглощения вносит рассеяние на акустическом деформационном потенциале. Полагая, что подвижность дырок относительно такого рассеяния составляет величину $\sim 800 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$, получаем α , $\text{см}^{-1} \approx 10^{-18} p$, см^{-3} при энергии фотона, близкой к E_g , где p — концентрация свободных дырок. Сечения поглощения $\approx 10^{-18} \text{ см}^2$ недостаточно для объяснения наблюдаемого подъема $\alpha(\omega)$ при малых частотах. Аналогичное поведение $\alpha(\omega)$ могло бы обеспечить также поглощение между подзонами легких и тяжелых дырок, но энергетическое расстояние

между ними, определяемое из зонной модели Кейна (рис. 1, а), не позволяет получить необходимые значения $\alpha(\omega)$. Возможно, за поглощение в диапазоне энергий 0.60—0.65 эВ ответственны другие механизмы рассеяния при поглощении на свободных носителях заряда или известные соотношения [15] недостаточно адекватно описывают физическую картину поглощения на свободных носителях, или реальная зонная структура валентной зоны GaSb несколько отличается от предсказываемой моделью Кейна.

Параметр	GaSb	InAs
E_0 , эВ	30	30
ϵ^*	41.5	62.5
E_{NPO} , эВ	6.3	6.1
E , эВ	6.0	6.1
$s \cdot 10^{-5}$, см/с	2.0	2.3
$c \cdot 10^{-12}$, дин/см ²	0.64	0.55
$c_l \cdot 10^{-12}$, дин/см ²	1.2	1.03
P_{PE}	0.015	0.016
m_{e1}/m_0	0.042	0.024
m_h/m_0	0.5	0.4
m_{s1}/m_0	0.14	0.083
Δ , эВ	0.750	0.380
$E_g(80 \text{ K})$, эВ	0.800	0.420
$E_g(300 \text{ K})$, эВ	0.726	0.356

На рис. 3 представлены результаты вычислений для $S-H$ -поглощения в InAs. При 80 К и больших концентрациях дырок на $S-H$ -поглощение начинает влиять вырождение носителей, вследствие чего коэффициент поглощения насыщается с ростом p (рис. 3, а). Поэтому уже нельзя ввести понятие сечения поглощения $\sigma(\omega)$. На рисунке стрелками показано энергетическое положение спин-орбитального отщепления Δ . Характерно, что и в GaSb, и в InAs при 80 К

$E_g > \Delta$, а при 300 К $E_g < \Delta$. Вследствие этого поглощение на частоте $\hbar\omega \approx E_g$ при 80 К существенно выше, чем при 300 К, но при 300 К электрон-фононное взаимодействие приводит к достаточно плавному поведению $\alpha(\omega)$, так что даже при 300 К достигает значительных величин, и при $\hbar\omega \approx E_g$ сечение поглощения достигает значений $\sigma_{SH} \approx 10^{-17} \text{ см}^2$ как для GaSb, так и для InAs.

при 80 К существенно выше, чем при 300 К, но при 300 К электрон-фононное взаимодействие приводит к достаточно плавному поведению $\alpha(\omega)$, так что даже при 300 К достигает значительных величин, и при $\hbar\omega \approx E_g$ сечение поглощения достигает значений $\sigma_{SH} \approx 10^{-17} \text{ см}^2$ как для GaSb, так и для InAs.

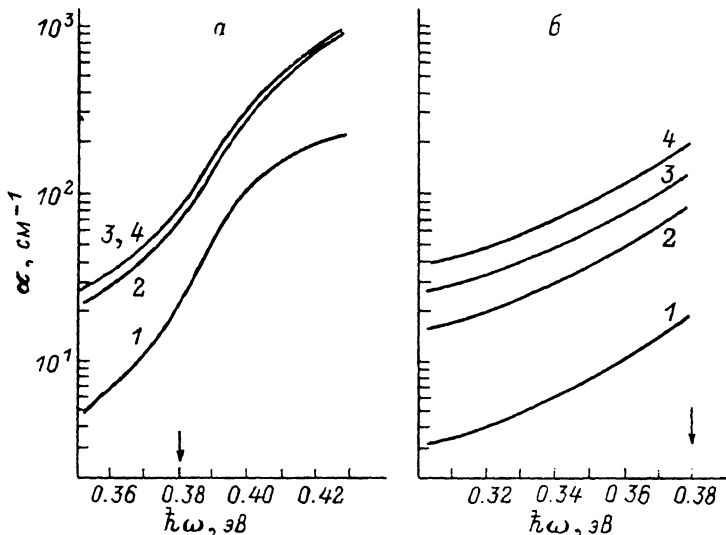


Рис. 3. Спектры оптического поглощения $\alpha_{SH}(\omega)$ в InAs при 80 (а) и 300 К (б).

Стрелками показано положение $\Delta \cdot 10^{-14}$, см⁻³: 1 — 1, 2 — 5, 3 — 10, 4 — 20.

Представленные результаты показывают, что поглощение света при переходах между спин-орбитальной отщепленной подзоной и подзоной тяжелых дырок в полупроводниковых соединениях A^{III}B^V p -типа с $\Delta \approx E_g$ может быть значительным (сечение поглощения в GaSb и InAs $\sigma_{SH} \approx 10^{-17} \text{ см}^2$), и при разработке полупроводниковых лазеров ИК диапазона необходимо использовать твердые растворы бинарных полупроводниковых соединений A^{III}B^V для увеличения расстройки спин-орбитального расщепления и ширины запрещенной зоны. Также может оказаться полезным использование в качестве активной области

полупроводников, легированных донорами, так как в полупроводниках n -типа концентрация неравновесных дырок на пороге генерации лазера ниже, чем в нелегированных материалах.

Следует отметить, что в данной работе использованы матричные элементы электрон-фононного рассеяния для простой валентной зоны. Следствием этого является отсутствие в формулах (7) интегралов перекрытия, свойственных сложной валентной зоне, а также интерференционных членов для различных каналов рассеяния в выражении для затухания $\Gamma(k, \varepsilon)$ (6). Несмотря на простоту модели, удается получить качественное и удовлетворительное количественное согласие с экспериментальными результатами. Учет сложной структуры валентной зоны является дальнейшим развитием данной работы.

В заключение авторы выражают благодарность А. Н. Титкову за полезное обсуждение результатов работы.

Л и т е р а т у р а

- [1] Kaiser W., Collins R., Fan H. — Phys. Rev., 1953, v. 91, N 6, p. 1380—1381.
- [2] Huldt L., Stalfin T. — Phys. Rev. Lett., 1958, v. 1, N 2, p. 313—315.
- [3] Уханов Ю. Н. Оптические свойства полупроводников. М., 1977. 366 с.
- [4] Braunstein R., Kane E. — J. Phys. Chem. Sol., 1962, v. 23, N 10, p. 1423—1430.
- [5] Gobeli G., Fan H. — Phys. Rev., 1960, v. 119, N 2, p. 613—620.
- [6] Clark G., Holonyak J. — Phys. Rev., 1956, v. 103, N 6, p. 1763—1772.
- [7] Becker W., Ramdas A., Fan M. — J. Appl. Phys., 1961, v. 32 (Suppl.), N 10, p. 2094—2102.
- [8] Mozer A., Romaneck K. M. et al. — IEEE J. Quant. Electron., 1983, v. QE-19, N 6, p. 913—916; Asada M., Suematsu Y. — IEEE J. Quant. Electron., 1983, v. QE-19, N 6, p. 917—923; Henry Ch., Logan R. A. et al. — IEEE J. Quant. Electron., 1983, v. QE-19, N 6, p. 947—952.
- [9] Takeshima M. — Japan. J. Appl. Phys., 1984, v. 23, N 4, p. 428—435.
- [10] Илуридэ Г. Н., Титков А. Н., Чайкина Е. И. — ФТП, 1987, т. 21, в. 1, с. 80—83.
- [11] Набиев Р. Ф., Попов Ю. М. — Препринт ФИ АН СССР, № 175. М., 1987. 25 с.
- [12] Mahan G. D. Many-Particle Physics. N. Y., 1981. 1003 p.
- [13] Kane E. — J. Phys. Chem. Sol., 1957, v. 1, N 2, p. 249—261.
- [14] Кейси Х., Паниш М. Лазеры на гетероструктурах, т. 1. М., 1981. 304 с.
- [15] Зеегер К. Физика полупроводников. М., 1977. 608 с.

Физический институт
им. П. Н. Лебедева АН СССР
Москва

Получена 19.01.1987
Принята к печати 9.11.1987