©1995 г.

МЕЖПОДЗОННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА В КВАНТОВОЙ ЯМЕ ПОЛУПРОВОДНИКА СО СЛОЖНОЙ ЗОННОЙ СТРУКТУРОЙ

Л.Е.Голуб, Е.Л.Ивченко, Р.Я.Расулов

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе Российской академии наук, 194021, Санкт-Петербург, Россия
(Получена 24 ноября 1994 г. Принята 6 декабря 1994 г.)

Построена теория межподзонного поглощения света в структуре с квантовыми ямами p-типа проводимости на основе полупроводников с решеткой цинковой обманки. Рассчитан вклад в спектр поглощения, связанный с переходами между нижними подзонами размерного квантования дырок. Показано, что в поляризации $\mathbf{e} \perp z$, где z — главная ось структуры, в спектре доминирует обратная корневая особенность, обусловленная наличием минимума в энергетическом расстоянии между подзонами при отличном от нуля значении двумерного волнового вектора дырки. Проанализировано влияние анизотропии дырочной дисперсии на спектр оптического поглощения.

В структурах с квантовыми ямами каждая энергетическая зона объемного полупроводника превращается в серию электронных подзон. Валентная зона Γ_8 в полупроводниках типа GaAs состоит из двух, смыкающихся в Г-точке, ветвей тяжелых и легких дырок. В квантовой яме каждая ветвь порождает свою серию подзон. При отличном от нуля волновом векторе дырки $\mathbf{k}$, характеризующем ее движение в плоскости интерфейса, подзонные состояния из разных серий смешиваются и энергетическая дисперсия дырок имеет сложный непараболический вид [1–6]. В частности, известно, что расстояние между двумя нижними дырочными подзонами немонотонно зависит от волнового вектора дырки k и достигает минимума при некотором значении k_0. В настоящей работе проанализирована особенность в спектре поглощения, связанная с прямыми переходами между парой нижних подзон при $k \approx k_0$ в структуре с квантовыми ямами на основе полупроводников со структурой цинковой обманки. Спектры межподзонного поглощения в полупроводниковых квантовых ямах p-типа проводимости рассчитывались численно в работе [7], в которой основное внимание уделено эффектам насыщения межподзонных переходов, а связь между приведенной плотностью состояний и поглощением специально не анализировалась. В [8,9] теоретически изучались особенности в спектре поглощения при энергиях кванта $\hbar\omega \simeq E_{\nu'}(0) - E_\nu(0)$, где $E_\nu(\mathbf{k})$ — энергия дырки в подзоне ν с волновым вектором $\mathbf{k}$. В этом случае можно было ограничиться расчетом дырочных состояний с малыми значениями $\mathbf{k}$, использовать теорию возмущений и разлагать $E_\nu(\mathbf{k})$ и матричные элементы оптических переходов по степеням $\mathbf{k}$. Так как безразмерный параметр $k_0 a/\pi$, где a — ширина квантовой ямы, порядка единицы, при расчете вклада в коэффициент поглощения света от состояний с $k \approx k_0$ нельзя использовать теорию возмущений с сохранением небольшого числа членов разложения по степеням $\mathbf{k}$.

Для простоты рассмотрение проводится в модели квантовой ямы с бесконечно высокими барьерами и используется представление волновой функции дырки в методе эффективного гамильтониана Латтинжера. Однако полученные результаты применимы для качественного анализа межподзонного поглощения света и в квантовых ямах с конечными барьерами. В основной части работы расчет проводится в сферическом приближении, т.е. при совпадающих параметрах Латтинжера γ_2 и γ_3. В заключительной части обсуждается, к чему приводит учет гофрированности энергетических поверхностей.

В дальнейшем мы изучаем регулярную структуру с прямоугольными квантовыми ямами шириной a и барьерами шириной b. В симметричной квантовой яме пару вырожденных подзонных состояний $\psi_{\mathbf{k}}^{(n)}(\mathbf{r})$ можно выбрать так, чтобы одно из них было симметричным, а другое — антисимметричным по отношению к операции отражения $\hat{\sigma}_z \psi_{\mathbf{k}}^{(n)}(x, y, -z)$ в плоскости $z = 0$, расположенной посредине ямы [5]. В сферическом приближении четыре огибающих волновой функции

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(n)}(\mathbf{r}) = \sum_{m=-3/2}^{3/2} \psi_{\mathbf{k},m}^{(n)}(\mathbf{r}) u_m(\mathbf{r}) \tag{1}$$

для симметричного состояния в подзоне ν можно представить в виде

$$\hat{\varphi}_{\mathbf{k}}^{(\nu,s)}(\mathbf{r}) = N e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\rho}} \begin{bmatrix} -C(z) \\ i\sqrt{3}\zeta W_- S(z) o_+ \\ -\sqrt{3} W_+ C(z) o_+^2 \\ i\zeta S(z) o_+^3 \end{bmatrix}. \tag{2}$$

Здесь $o_+ = (k_x + ik_y)/k$, $\boldsymbol{\rho}$ — двумерный вектор (x, y), N — нормировочный множитель,

$$\zeta = \operatorname{sign}\left(\frac{W_+ - 1}{W_-}\right) \left[\frac{W_+(W_+ - 1)}{W_-(1 - W_-)}\right]^{1/2}, \tag{3}$$

$C(z)$ и $S(z)$ — соответственно четная и нечетная функции координаты z, выражения для них, а также для вещественных множителей W_+, W_- приведены в [5]. Огибающие $\varphi_{\mathbf{k},m}^{(\nu,a)}(\mathbf{r})$ для антисимметричного состояния получаются из $\varphi_{\mathbf{k},-m}^{(\nu,s)}(\mathbf{r})$ заменой $\mathbf{r}$ на $-\mathbf{r}$, комплексным сопряжением и умножением на коэффициент, связывающий блоховскую функцию $u_m(\mathbf{r})$ с функцией $\hat{K} u_{-m}(\mathbf{r})$, где $\hat{K}$ — операция инверсии времени:

$\hat{K}u = -i\hat{\sigma}_y u^*$. Таким образом, в используемом представлении индекс n в (1) пробегает значения (ν, s) и (ν, a).

Если период $d = a + b$ удовлетворяет условию $qd \ll 1$, где q — волновой вектор света, то такую структуру можно рассматривать как оптически однородную среду с коэффициентом поглощения

$$K(\omega) = \frac{\omega}{cn_\omega} \operatorname{Im} \varepsilon, \tag{4}$$

где n_ω — показатель преломления света на частоте ω, а мнимая часть эффективной диэлектрической проницаемости для межподзонных переходов определяется выражением

$$\operatorname{Im} \varepsilon = \frac{4\pi^2 e^2}{\omega^2 S d} \sum_{n'n\mathbf{k}} |\mathbf{e}\mathbf{v}_{n'n}(\mathbf{k})|^2 (f_{\nu k} - f_{\nu' k}) \delta\Big(\Delta_{\nu'\nu}(k) - \hbar\omega\Big). \tag{5}$$

Здесь $\Delta_{\nu'\nu}(k) = E_{\nu'}(k) - E_\nu(k)$, $f_{\nu k}$ — функция распределения дырок, S — площадь образца в плоскости интерфейса, $\mathbf{e}$ — вектор поляризации света, $\mathbf{v}_{n'n}(\mathbf{k})$ — матричный элемент оператора скорости $\hat{\mathbf{v}}$, который в методе эффективной массы имеет вид матрицы $\partial H(\mathbf{p})/\partial \mathbf{p}$, где $H(\mathbf{p})$ — гамильтониан Латтинжера, $\mathbf{p}$ — оператор импульса $-i\hbar\nabla$. При нормальном падении света на интерфейсы коэффициент (4) связан с относительной энергией $\Delta J/J$ электромагнитного излучения, поглощаемой в изолированной квантовой яме, соотношением $\Delta J/J = K(\omega)d$.

Запишем коэффициент поглощения в виде суммы вкладов, соответствующих переходам между парами подзон ν и ν':

$$K(\omega) = \sum_{\nu'\nu} K_{\nu'\nu}(\omega).$$

Для линейно поляризованного излучения выражения для парциальных вкладов можно представить в виде

$$K_{\nu'\nu}(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{\omega c n_\omega d} \sum_i Q_i \rho_{\nu'\nu}(\hbar\omega, k_i)(f_{\nu k_i} - f_{\nu' k_i}), \tag{6}$$

$$Q_i(\mathbf{e} \perp z) = \left\langle |\mathbf{e}\mathbf{v}_{\nu's,\nu s}(\mathbf{k}_i)|^2 \right\rangle, \quad Q_i(\mathbf{e} \parallel z) = \left\langle |\mathbf{e}\mathbf{v}_{\nu'a,\nu s}(\mathbf{k}_i)|^2 \right\rangle.$$

Здесь угловые скобки означают усреднение по направлениям вектора $\mathbf{k}$, k_i — корни уравнения $\Delta_{\nu'\nu}(k) = \hbar\omega$ при фиксированных ν' и ν, $\rho_{\nu'\nu}(\hbar\omega, k_i)$ — приведенная плотность состояний, соответствующая корню k_i:

$$\rho_{\nu'\nu}(\hbar\omega, k_i) = \frac{k_i}{\pi} \left| \frac{d\Delta_{\nu'\nu}(k)}{dk} \right|_{k_i}^{-1}.$$

Матричные элементы $\mathbf{e}\mathbf{v}_{n'n}(\mathbf{k})$ можно рассчитать, используя четырехкомпонентные огибающие (2). Для иллюстрации мы приведем здесь выражение для одного из таких матричных элементов,

$$\mathbf{e}\mathbf{v}_{\nu's,\nu s}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar}{m_0} \gamma_2 N_{\nu'} N_\nu (H_{ss}^{(\nu'\nu)} e_+ o_- + H_{ss}^{(\nu\nu')} e_- o_+), \tag{7}$$

$$H_{ss}^{(\nu'\nu)} = k\Big[P_{cc}^{(\nu'\nu)}(1-3W_{+}^{(\nu')}) + \zeta_{\nu'}\zeta_{\nu}P_{ss}^{(\nu'\nu)}(1-3W_{+}^{(\nu)})\Big] +$$
$$+ 3\zeta_{\nu'}R_{sc}^{(\nu'\nu)}(W_{+}^{(\nu)} - W_{-}^{(\nu')}),$$

где

$$P_{cc}^{(\nu'\nu)} = \int\limits_{-a/2}^{a/2} dz C_{\nu'}(z)C_{\nu}(z), \qquad P_{ss}^{(\nu'\nu)} = \int\limits_{-a/2}^{a/2} dz S_{\nu'}(z)S_{\nu}(z),$$

$$R_{sc}^{(\nu'\nu)} = \int\limits_{-a/2}^{a/2} dz S_{\nu'}(z)\frac{d}{dz}C_{\nu}(z),$$

$\epsilon_{\pm} = \epsilon_x \pm i\epsilon_y$, $o_{\pm} = (k_x \pm ik_y)/k$, функции $C_\nu(z), S_\nu(z)$ и коэффициенты $W_{\pm}^{(\nu)}, \zeta_\nu$ введены в (2), (3). Для переходов $(\nu, a) \to (\nu', a)$ также применима формула типа (7) с коэффициентами $H_{aa}^{(\nu'\nu)} = -H_{ss}^{(\nu'\nu)}$. Заметим, что величина $Q_i(\mathbf{e} \perp z)$ в (6) пропорциональна сумме квадратов $H_{ss}^{(\nu'\nu)}$ и $H_{ss}^{(\nu\nu')}$.

На рис. 1 показана дисперсия валентных подзон, рассчитанная для квантовой ямы шириной $a = 200$ Å в модели бесконечно высоких барьеров при эффективных массах тяжелых и легких дырок $m_{hh} = 0.51m_0$, $m_{lh} = 0.082m_0$ (m_0 — масса свободного электрона). В сферическом приближении ($\gamma_2 = \gamma_3$) подзоны $hh1, hh3, \ldots, lh2, lh4, \ldots$ и $hh2, hh4, \ldots, lh1, lh3, \ldots$ образуют две подсистемы, удовлетворяющие независимым дисперсионным уравнениям [3,5]. Поэтому возможно случайное пересечение ветвей, относящихся к разным подсистемам, как это происходит на рис. 1 для ветвей $lh1$ и $hh3$. Учет конечности высоты барьеров и кубической анизотропии гамильтониана Латтинжера

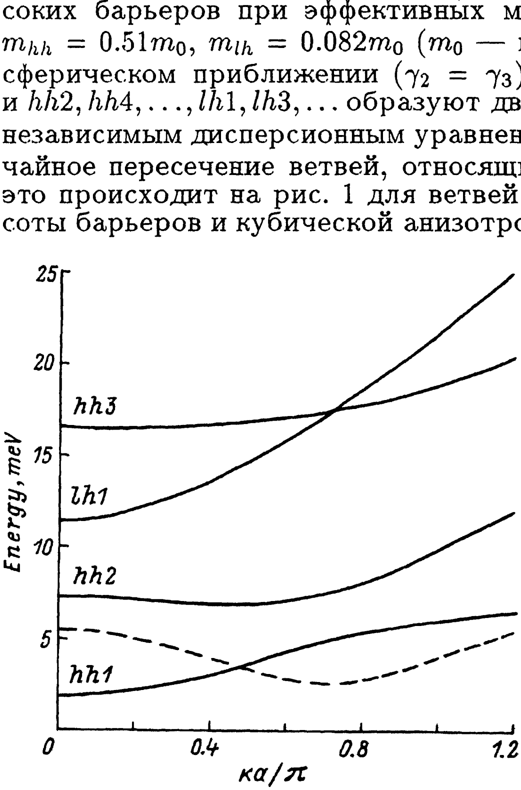

Рис. 1. Энергетическая дисперсия дырочных подзон $hh\nu$ ($\nu = 1, 2, 3$) и $lh1$. Штриховая кривая — разность $\Delta_{21}(k) = E_{hh2}(k) - E_{hh1}(k)$.

($\gamma_2 \neq \gamma_3$) должен приводить к снятию случайного вырождения и антипересечению этой пары ветвей [10,11]. Штриховой кривой на рис. 1 показана разность $\Delta_{21}(k)$. Эта разность достигает при $ka/\pi \simeq 0.7$ минимального значения $\Delta_0 = 2.6$ мэВ. Поэтому приведенная плотность состояний

$$\rho_{21}(E) = \frac{2}{S} \sum_{\mathbf{k}} \delta[E - \Delta_{21}(\mathbf{k})]$$

при $E \approx \Delta_0$, где применимо разложение $\Delta_{21}(k) \approx \Delta_0 + \hbar^2(k-k_0)^2/2\mu_{21}$, имеет корневую особенность

$$\rho_{21}(E) \approx \frac{k_0}{\pi} \sqrt{\frac{2\mu_{21}}{\hbar^2}} \frac{1}{\sqrt{E - \Delta_0}}. \tag{8}$$

Для подзон $hh1, hh2$ на рис. 1 параметр μ_{21}, имеющий размерность массы, составляет $\sim 0.04m_0$. Таким образом, в спектре межподзонного оптического поглощения должна присутствовать особенность

$$K(\omega) \propto \frac{1}{\sqrt{\hbar\omega - \Delta_0}}, \tag{9}$$

на возможность которой обращалось внимание в [4].

На рис. 2 приведены результаты численного расчета вклада в коэффициент поглощения электромагнитного излучения, связанного с переходами между подзонами $hh1$ и $hh2$. Двумерная концентрация $p_s = 5 \cdot 10^{11}$ см$^{-2}$ выбрана из условия, чтобы уровень Ферми лежал ниже дна второй подзоны, а импульс Ферми $\hbar k_F$ превышал $\hbar k_0$. При нулевой температуре коэффициент $K_{21}(\omega)$ отличен от нуля в пределах от $\hbar\omega_{\min} = \Delta_0$ до $\hbar\omega_{\max} = \max[\Delta_{21}(0), \Delta_{21}(k_F)]$. При использованных значениях параметров энергия $\hbar\omega_{\max}$ превышает крайнее значение 4 мэВ на шкале абсцисс, и обрыва спектра $K_{21}(\omega)$ не видно. Обращает на себя внимание, что в поляризации $\mathbf{e} \perp z$ в спектре корневая особенность

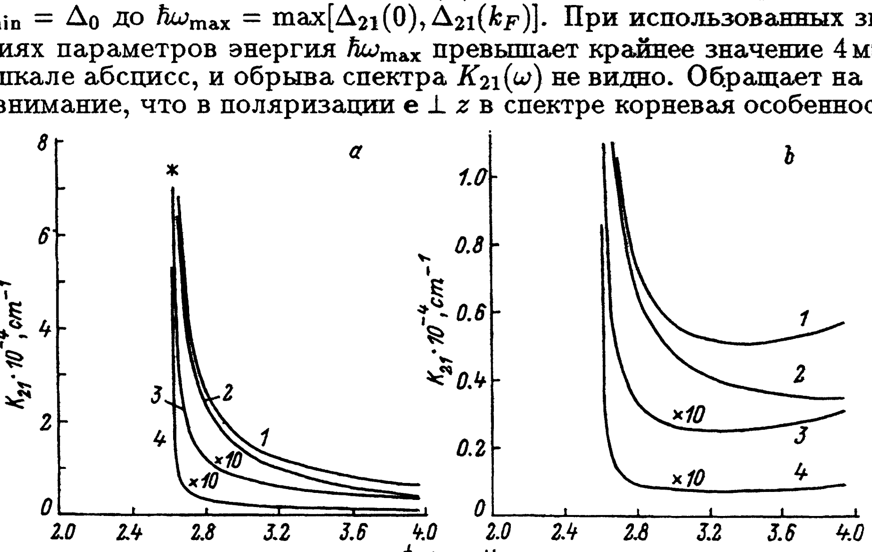

Рис. 2. Спектры поглощения в периодической структуре с квантовыми ямами $K_{21}(\omega)$ в поляризации $\mathbf{e} \perp z$ (*a*) и $\mathbf{e} \parallel z$ (*b*).
T, K: *1* — 0, *2* — 4.2, *3* — 77, *4* — 150. Параметры расчета: $m_{hh} = 0.51m_0$, $m_{lh} = 0.082m_0$, $a = 200$ Å, $b = 100$ Å, $p_s = 5 \cdot 10^{11}$ см$^{-2}$, $n_\omega = 4$. Звездочкой показано значение K_{21} на пороговой частоте с учетом анизотропии ($T = 0$, $\mathbf{e} \perp z$).

(9) доминирует, тогда как в поляризации $\mathbf{e} \parallel z$ интегрально она играет меньшую роль по сравнению с вкладом плавной составляющей, возрастающей с ростом частоты ω. Заметим также, что в области $\hbar\omega$ от Δ_0 до ~ 3.4 мэВ свет, поляризованный перпендикулярно главной оси структуры, поглощается сильнее, чем при $\mathbf{e} \parallel z$, в отличие от поляризационной зависимости вклада в поглощение от дырок с малыми k, т.е. при $\hbar\omega \approx \Delta_{21}(0)$, так как при $k = 0$ оптические переходы $hh1 \to hh2$ разрешены только в поляризации $\mathbf{e} \parallel z$.

Согласно (7) при нормальном падении на структуру линейно поляризованного излучения вероятность переходов $(hh1, \mathbf{k}) \to (hh2, \mathbf{k})$ имеет простую зависимость от угла Φ между вектором поляризации $\mathbf{e}$ и вектором $\mathbf{k}$:

$$w_{21} \propto 1 + \chi \cos 2\Phi, \tag{10}$$

где

$$\chi = \frac{2H_{ss}^{(21)} H_{ss}^{(12)}}{(H_{ss}^{(21)})^2 + (H_{ss}^{(12)})^2}.$$

Коэффициент χ описывает оптическое выстраивание неравновесных дырок по двумерному квазиимпульсу. Расчет показывает, что для переходов вблизи порога Δ_0 этот коэффициент составляет ~ 0.3.

Наличие кубической анизотропии гамильтониана Латтинжера приводит к зависимости минизонного спектра $E_\nu(\mathbf{k})$, а значит, и минимального зазора Δ_0, от ориентации вектора $\mathbf{k}$ в плоскости интерфейса. На рис. 3 представлена зависимость Δ_0 от угла ϕ между осью $x \parallel [100]$ и вектором $\mathbf{k}$, рассчитанная для структуры, выращенной вдоль направления $z \parallel [001]$.

Как видно, функция $\Delta_0(\phi)$ при $\phi = 0$ и $45°$ достигает соответственно минимального и максимального значений, которые различаются между собой на 20%. Следовательно, функция $\Delta_{21}(\mathbf{k})$ имеет минимум

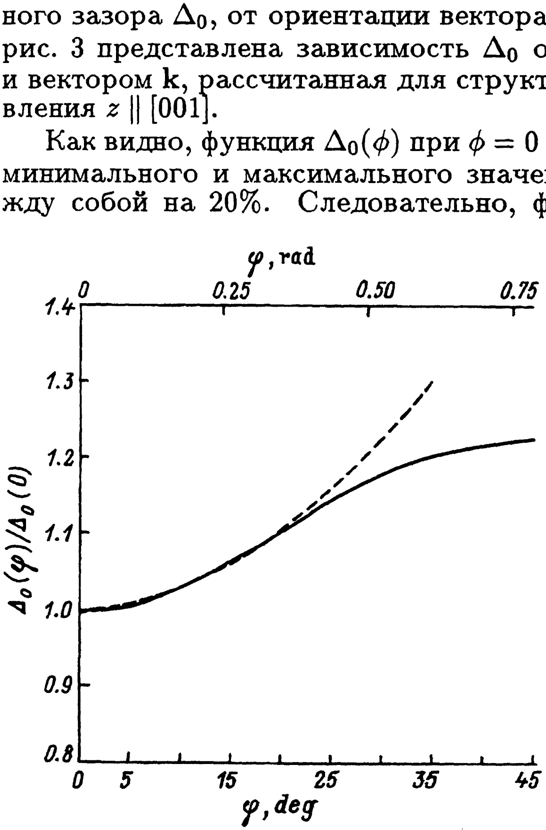

Рис. 3. Зависимость минимального энергетического зазора между подзонами $hh1$ и $hh2$ от угла ϕ между волновым вектором дырки и осью $x \parallel [100]$. Штриховая линия — приближенная зависимость (12), рассчитанная при $\mu_y = 12m_0$.

в точках двумерного k-пространства с координатами $(\pm k_0, 0), (0, \pm k_0)$. Вблизи точки $(k_0, 0)$ в параболическом приближении имеем

$$\Delta_{21}(k_x, k_y) \approx \Delta_{21}(k_0, 0) + \frac{\hbar^2 (k_x - k_0)^2}{2\mu_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2\mu_y}, \qquad (11)$$

где μ_x совпадает с введенной выше массой μ_{21}. Поэтому при малых углах ϕ получаем для минимального зазора

$$\Delta_0(\phi) \simeq \Delta_{21}(k_0, 0) + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2\mu_y}\phi^2. \qquad (12)$$

С учетом анизотропии корневая особенность (9) размывается, но прямое поглощение по-прежнему будет иметь пороговый характер. Значение коэффициента поглощения на пороговой частоте $\Delta_{21}(k_0, 0)/\hbar$, рассчитанное по формуле

$$K_{21} = \frac{4\pi^2 e^2}{\omega c n_\omega d} 2\rho_0 \left(|v_{x;2s,1s}(\mathbf{k}_0)|^2 + |v_{y;2s,1s}(\mathbf{k}_0)|^2 \right), \qquad (13)$$

показано на рис. 2 звездочкой. В (13) введены обозначения: $v_{\alpha;2s,1s}(\mathbf{k}_0)$ — матричный элемент оператора скорости $\hat{v}_\alpha$ $(\alpha = x, y)$ в одной из точек экстремума, ρ_0 — приведенная плотность состояний на дне двумерной долины:

$$\rho_0 = \frac{\sqrt{\mu_x \mu_y}}{\pi \hbar^2}.$$

Заметим, что в спектрах поглощения, рассчитанных в [7], вблизи пороговой частоты для переходов между двумя нижними подзонами $hh1, lh1$ отчетливо виден острый пик в качественном согласии с результатами проведенного анализа.

Кроме анизотропии энергетического спектра на особенность (9) влияют электрон-электронное взаимодействие и корреляционные эффекты [12], которые могут изменить пороговую частоту $\Delta_0/\hbar$.

В заключение авторы выражают благодарность Л.Е.Воробьеву, У.Ресслеру (U.Rößler) и А.В.Субашиеву за полезные обсуждения, а также А.Г.Петрову и А.Я.Шику за возможность ознакомиться со статьей [9] до ее опубликования.

Работа частично финансировалась за счет гранта № NUB000 Международного научного фонда и Российского фонда фундаментальных исследований (проект 93-02-02410).

Список литературы

[1] С.С. Недорезов. ФТТ, **12**, 2269 (1970).
[2] А. Матулис, К. Пирагас. ФТП, **9**, 2202 (1975).
[3] М.И. Дьяконов, А.В. Хаецкий. ЖЭТФ, **82**, 1584 (1982).
[4] А.В. Чаплик, Л.Д. Шварцман. Поверхность, **1**, вып. 2, 73 (1982).
[5] И.А. Меркулов, В.И. Перель, М.Е. Портной. ЖЭТФ, **99**, 1202 (1991).
[6] G.E. Marques, V.N. Chitta. J. Phys. C, **20**, 727 (1987).
[7] Y.-C. Chang, R.B. James. Phys. Rev. B, **39**, 12672 (1989).
[8] Р.Я. Расулов. Автореф. канд. дисс. (С.-Петербург, 1993).

[9] А.Г. Петров, А.Я. Шик. ФТП, **28**, 2193 (1994).
[10] З.Н. Соколова, В.Б. Халфин, Ал.Л. Эфрос. ФТР, **22**, 2124 (1988).
[11] Л.Г. Герчиков, А.В. Субашиев. ФТП, **25**, 231 (1985).
[12] В.Я. Алешкин, Ю.А. Романов. ФТП, **27**, 329 (1993).

Редактор Л.В. Шаронова

Intersubband absorption of light in a semiconductor quantum well with complicated band structure

L.E.Golub, E.L.Ivchenko, R.Ya.Rasulov

A.F.Ioffe Physicotechnical Institute, Russian Academy of Sciences, 194021 St. Petersburg, Russia

A theory of intersubband absorption of light has been developed for a p-type quantum-well structure that is based on semiconductors having a zincblende lattice. Contribution to the absorption spectrum due to transitions between the lowest subbands of hole size quantization is calculated. It has been shown that in the polarization $\mathbf{e} \perp z$, z being the structure principal axis, in the spectrum dominates an inverse square-root singularity due to the minimum in the intersubband energy spacing when the two-dimensional hole wave vector is other than zero. The effect of the hole dispersion anisotropy on the optical absorption is analysed.