

ДВУХФОТОННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ В МНОГОЯМНОЙ КВАНТОВОЙ СТРУКТУРЕ GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs

© С.К.Аветисян, А.О.Меликян, Г.Р.Минасян

Армянский государственный инженерный университет,
Ереван, Армения
(Получена 22 ноября 1995 г. Принята к печати 12 января 1996 г.)

Теоретически рассмотрено двухфотонное поглощение в широкобарьерной гетероструктуре GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs ($x \leq 0.35$) и проведено сравнение с экспериментом. В расчетах учтены реальная зонная структура материалов ямы и барьера, а также конечность энергетических скачков ΔE_c , ΔE_v для потенциала гетероструктуры. В случае поляризации $e \parallel z$ дано отличное от работы [1] объяснение отсутствия поглощения в яме, основанное на учете конечности глубины потенциальной ямы. Предложен эксперимент, позволяющий для рассмотренных структур из приведенных в литературе значений отношения $\Delta E_c/\Delta E_v$ выбирать наиболее близкое к действительному значение.

Теоретическому исследованию коэффициента двухфотонного межзонного поглощения в полупроводниковых структурах пониженной размерности посвящены работы [1,2]. В [1] рассмотрено двухфотонное поглощение для квазиодномерных и квазидвумерных многоямных квантовых структур МКС. Задача в [1] решена в приближении эффективной массы в двухзонной изотропной параболической модели полупроводника в пренебрежении экситонными эффектами и расщеплением валентной зоны при переходе от массивного образца к квантовым ямам. В [2] рассмотрено двухфотонное поглощение в двумерной квантовой структуре с учетом нелокальных эффектов. Здесь, как и в [1], рассмотрена простая двухзонная модель в предположении бесконечно глубоких ям. Реальные квантовые потенциальные ямы в МКС и сверхрешетки имеют конечную глубину и приведенные в работах [1,2] выражения непригодны для количественного анализа энергий квантовых состояний и оптических спектров в вышеотмеченных структурах.

В данной работе теоретически рассмотрено двухфотонное поглощение в широкобарьерной гетероструктуре GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs ($x \leq 0.35$) с учетом реальной зонной структуры материалов квантовых ям и конечности энергетических разрывов ΔE_c , ΔE_v и проведено сравнение с экспериментом [3]. Предполагается, что МКС широкобарьерная, т.е. туннельными переходами носителей между отдельными ямами МКС

пренебрегается [4]. В широкобарьерной МКС коэффициент двухфотонного поглощения определяется соотношением

$$\alpha^{(2)} = \frac{2\hbar\omega W^{(2)}}{I(a + a_B)}, \quad (1)$$

где $W^{(2)}$ — скорость межзонных двухфотонных переходов на единицу площади квантовой ямы, I — интенсивности света, a — ширина квантовой ямы узкозонного материала (GaAs), a_B — ширина барьера $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$.

Для вычисления составного матричного элемента $M^{(2)}$ двухфотонного перехода ограничимся учетом линейных по k_{\perp} членов в разложении, соответствующих разрешенно-запрещенным переходам (для кристаллов типа $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$ разрешенно-разрешенные переходы вносят пренебрежимо малый вклад [5,6]).

Рассмотрим переход из вырожденной валентной зоны в зону проводимости ($2\hbar\omega - E_g \ll E_g$, где E_g — ширина запрещенной зоны GaAs). Поскольку в массивном полупроводнике $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$ симметрии T_d в рассмотренной области частот хорошо применимо приближение, где учтены зона проводимости и все три ветви валентной зоны, будем работать с четырехзонной моделью полупроводника [7]. Так как энергия размерного квантования $\pi^2\hbar^2/2m_{e,v}a^2$, как правило, намного меньше E_g (рассматриваются не слишком тонкие квантовые слои), применяя метод огибающей функции [8] для $M^{(2)}$ можем написать

$$M_{cs,vj}^{(2)}(\mathbf{k}_{\perp}, \mathbf{e}, \omega) = \int_{v_0} d\mathbf{r} f_s^{c*}(\mathbf{r}) V_{cs,vj}^{(2)}(\mathbf{k}_{\perp}, \hat{k}_z, \mathbf{e}, \omega) f_j^v(\mathbf{r}), \quad (2)$$

где v_0 — объем квантового слоя, $f_{sj}^{c(v)} = F_{n(n')}^{c(v)} e^{i\mathbf{k}_{\perp}\mathbf{r}} \chi_{s(j)}$ — огибающие волновые функции электрона в c - и v -зонах, $s = \pm 1/2$ для зоны проводимости, $j = \pm 3/2$ для зоны тяжелых дырок (hh), $j = \pm 1/2$ для зоны легких дырок (lh). $V_{cs,vj}^{(2)}(\mathbf{k}_{\perp}, \hat{k}_z, \omega)$ получено из матричного элемента двухфотонного перехода для массивного образца $V^{(2)}(k_x, k_y, k_z)$ заменой $k_z \rightarrow \hat{k}_z = i\partial/\partial z$.

Огибающие функции получаются решением уравнения Шредингера для каждого типа частиц в одномерной прямоугольной потенциальной яме конечной глубины V (высота потенциального барьера $V_c = \Delta E_c$, $V_{lh} = V_{hh} = \Delta E_v$ зависит от состава x барьера $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ и является параметром задачи) в приближении эффективной массы.

Условие сшивания на границах ямы $z = 0$, $z = a$ приводит к следующему трансцендентному уравнению:

$$x = n - \frac{2}{\pi} \arcsin \frac{x}{\sqrt{U(1-x^2)(1-l)}}, \quad (3)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$, $x = \frac{ka}{\pi}$, $k = \sqrt{2m_A E/\hbar^2}$, $U = V/E_0$ — приведенная глубина ямы, E — энергия частиц, $E_0 = \pi^2\hbar^2/2m_A a^2$ — энергия первого уровня для частицы типа m_A в одномерной яме с шириной a и с

бесконечно высокими барьерами, $l = m_A/m_B$ — отношение масс для частицы данного типа (e, lh, hh) [9] в материале ямы и барьера. Решая (3), в отдельности для каждого типа частиц получим спектр энергий и параметры огибающих функций для электронов и дырок в соответствующих конечных ямах.

При вычислении (2) мы пользовались выражением $V^{(2)}$ для массивного полупроводника, соответствующим переходам $\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_6$ группы T_d [7]. Для межзонных матричных элементов квазиимпульса k , фигурирующих в (2), в рассмотренном нами случае получаются следующие выражения:

$$(k_{\perp})_{nn'} = B_n B_{n'} \frac{2k_{\perp} a \sin \alpha_{n'} \sin \alpha_n}{\pi} \left[\frac{l_n y_n - l_{n'} y_{n'}}{x_n^2 - x_{n'}^2} + \frac{1}{y_n - y_{n'}} \right], \quad (4)$$

$$(k_z)_{nn'} = i B_n B_{n'} [1 - (-1)^{n'-n}] \sin \alpha_n \cdot \sin \alpha_{n'} \left[\frac{l_n y_n l_{n'} y_{n'} + x_n^2}{x_n^2 - x_{n'}^2} + \frac{y_{n'}}{y_n + y_{n'}} \right], \quad (5)$$

$$E_n = E_0 x_n^2; \quad y_n = \sqrt{(U - x_n^2)/l}; \quad \sin \alpha_n = \frac{x_n}{\sqrt{Ul + x_n^2(1-l)}};$$

$$B_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \left(1 + \frac{2(x_n^2 + y_n^2 l_n)}{\pi y_n (x_n^2 + y_n^2 l_n^2)} \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (6)$$

Отметим, что в предельном случае бесконечно глубокий ям ($U \rightarrow \infty$) (3) имеет решение $x_n = n$, а (4), (5) и (6) переходят в известные выражения для энергии $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}$ и матричного элемента квазиимпульса в бесконечно глубокой яме [2]

$$k_{nn'} = k_{\perp} e_{\perp} \delta_{nn'} + e_z k_z \frac{[1 - (-1)^{n'+n}]}{n^2 - (n')^2} [1 - \delta_{nn'}].$$

Как видно из (5), для поляризации $\mathbf{e} \parallel \mathbf{z}$ в случае конечной потенциальной ямы, как и в случае бесконечной ямы, имеет место правило отбора, согласно которому $(k_z)_{nn'} = 0$ только при нечетных $\Delta n = n' - n$. Величина матричных элементов, однако, в случаях бесконечной и конечной ям отличаются. Для поляризации $\mathbf{e} \perp \mathbf{z}$ в отличие от случая бесконечно глубокого ям, где благодаря ортогональности решений в области ямы ($0 \leq z \leq a$) имеется правило отбора $\Delta n = n' - n = 0$, в случае конечных ям разрешены переходы при любых четных Δn , вероятность переходов, однако, с увеличением Δn уменьшается.

Для коэффициента поглощения $\alpha^{(2)}$ получается

$$\alpha^{(2)} = \frac{4\pi\omega}{a + a_B} \left(\frac{2\pi e^2}{m_0^2 \omega^2 c \kappa} \right)^2 I \sum_{\substack{cn, \\ v_i, n'}} \frac{\mu_{cv_i} L^2}{2\pi^2 \hbar^2 a^2} F_{nn'}(e) \Theta(2\hbar\omega - E_g - E_{co} x_n^2 - E_{vo} x_{n'}^2), \quad (7)$$

где μ_{cv_i} — приведенная эффективная масса электрона и соответствующей дырки, κ — показатель преломления на частоте ω , $L = \frac{\hbar P^3}{m_0 E_g^3}$,

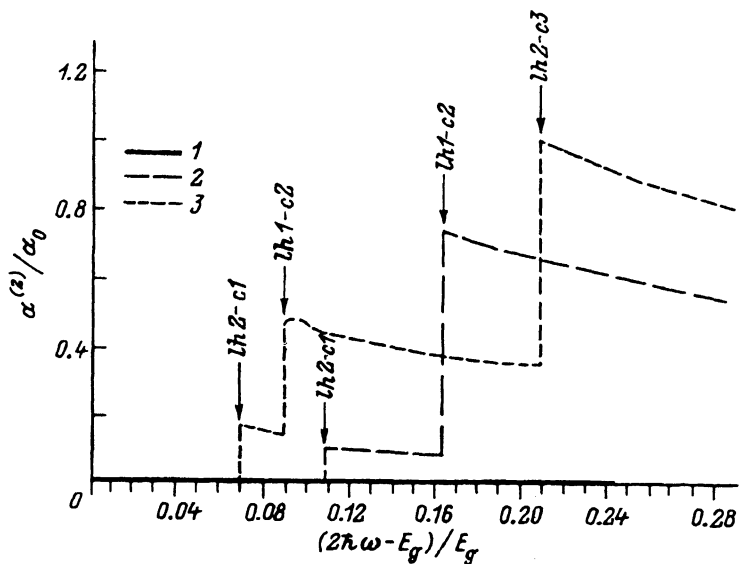


Рис. 1. Коэффициент двухфотонного поглощения $\alpha^{(2)}$ ($\alpha_0 = 5.23 \cdot 10^{-3}$ см/МВт) в МКС GaAs/Ga_{0.65}Al_{0.35}As с шириной барьера $a_B = 150$ Å для поляризации $e \parallel z$. a , Å: 1 — 40, 2 — 70, 3 — 110.

$P = \langle s|P_x|x \rangle$, $\Theta(x)$ — единичная ступенчатая функция, $F_{nn'}$ — безразмерный множитель, зависящий от $(k_\perp)_{nn'}$, $(k_z)_{nn'}$ и поляризации света, величина которого полностью определяется параметрами зонной структуры полупроводника. Значения параметра $F_{nn'}$ для гетероструктуры GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs, $T = 5$ К рассчитаны нами для всех представляющих интерес случаев. Так, для перехода $hh(n' = 1) \rightarrow c(n = 1)$ и $e \perp z$ получаем $F_{11} = 27.48(k_\perp)_{11}^2 a^2$ для линейной поляризации и $F_{11} = 16.59(k_\perp)_{11}^2 a^2$ для циркулярной поляризации, а для перехода $lh(n' - n) \rightarrow c(n = 1)$ и $e \perp z$ получаем $F_{11} = 9.49(k_\perp)_{11}^2 a^2$ для линейной поляризации и $F_{11} = 4.54(k_\perp)_{11}^2 a^2$ для циркулярной поляризации.

Переходы с нечетным $n' - n$ дают основной вклад при поляризации $e \parallel z$. Переходы $hh(1) \rightarrow c(2)$ и $hh(2) \rightarrow c(1)$ не дают вклада в поглощение согласно закону сохранения момента импульса. Для переходов $lh(1) \rightarrow c(2)$ и $lh(2) \rightarrow c(1)$ при линейной поляризации $e \parallel z$ получаем $F_{21} = 70.28(k_z)_{21}^2 a^2$. В выражении (4) и в последующих выражениях $F_{nn'}$

$$k_\perp^2 = \frac{2\mu_{cv}}{\hbar^2} (2\hbar\omega - E_g - E_{oc}x_n^2 - E_{ov}x_{n'}^2) \quad (8)$$

согласно закону сохранения энергии при двухфотонном поглощении.

Реальная зонная структура материалов гетероструктуры и конечность потенциальных ям для электронов и дырок в $\alpha^{(2)}$ проявляются в виде коэффициентов $F_{nn'}$, μ_{cv} , L и в матричных элементах (4), (5), определяющих силы осцилляторов соответствующих переходов. $\Theta(2\hbar\omega - E_g - E_{co}x_n^2 - E_{vo}x_{n'}^2)$ учитывает изменение порогов соответствующих переходов из-за конечности глубины потенциальных ям.

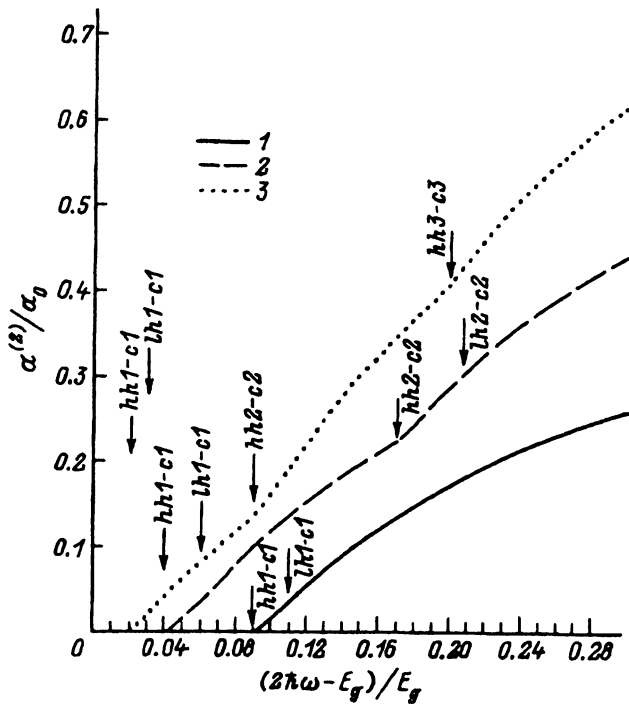


Рис. 2. Коэффициент двухфотонного поглощения $\alpha^{(2)}$ ($\alpha_0 = 1.86 \cdot 10^{-2}$ см/МВт) в МКС GaAs/Ga_{0.65}Al_{0.35}As с шириной барьера $a_B = 150$ Å для поляризации $e \perp z$. $a, \text{Å}$: 1 — 40, 2 — 70, 3 — 110.

Решение уравнения (3) для достаточно малых Va^2 показывает, что с уменьшением ширины или глубины ямы, в частности с уменьшением молярной доли Al в Ga_{1-x}Al_xAs, уменьшается число возможных квантовых состояний для электронов и дырок в яме. Так, при выбранных в эксперименте [3] значениях энергетических разрывов $E_c = 0.330$ эВ, $E_v = 0.107$ эВ и параметров $a = 110$ Å, $T = 5$ К при $x = 0.35$ наши расчеты дают три связанных состояния для электронов в яме и два состояния для легких дырок. Тогда как для образца с $a = 40$ Å получаются только по одному состоянию для электронов и легких дырок с энергиями $E_{c1} = 0.31E_{c0}$, $E_{lh1} = 0.22E_{lho}$ и два состояния для тяжелых дырок $E_{hh1} = 0.42E_{hho}$, $E_{hh2} = 1.45E_{hho}$.

Отмеченное значительное изменение энергетического спектра частиц играет решающую роль в спектре двухфотонного поглощения. Частотные зависимости $\alpha^{(2)}$ для исследуемых поляризаций $e \perp z$ и $e \parallel z$ для различных значений ширины квантовой ямы приведены на рис. 1 и 2. Расчеты проведены, в частности, для значений параметров гетероструктур, соответствующих эксперименту [3]. Как видно из рис. 1, при $a = 40$ Å $e \parallel z$ двухфотонное поглощение в яме отсутствует (кривая 1) в полном соответствии с экспериментом [3]. Авторы [3] объясняют это явление тем, что в условиях их эксперимента измерения проведены в области частот, где $2\hbar\omega$ меньше энергии перехода $lh(n' = 2) \rightarrow c(n = 1)$. Однако, как было показано выше, для $a = 40$ Å

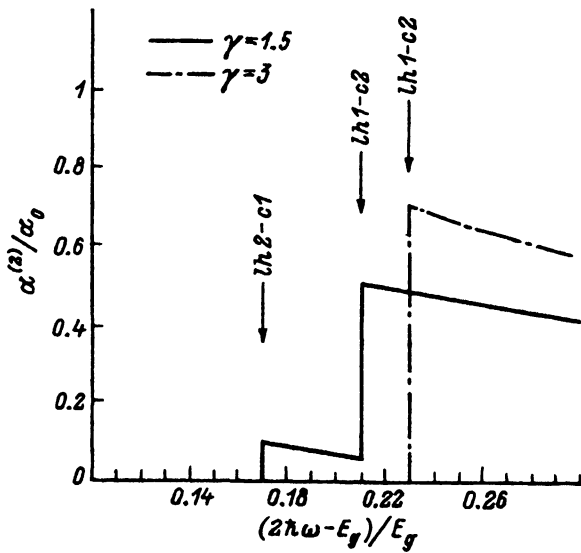


Рис. 3. Коэффициент двухфотонного поглощения $\alpha^{(2)}$ ($\alpha_0 = 5.23 \cdot 10^{-3}$ см/МВт) в МКС GaAs/Ga_{0.65}Al_{0.35}As с шириной квантовой ямы $a_B = 50$ Å для поляризации $e \parallel z$ для двух значений параметра $\gamma = \Delta E_c / \Delta E_v$.

в яме нет состояний для легких дырок и электронов с $n, n' > 1$. Следовательно, при $a = 40$ Å, $e \parallel z$ двухфотонное поглощение отсутствует не только в области частот, исследуемой в эксперименте [3], но и в более широкой области частот, вплоть до порога двухфотонных переходов «связанное состояние → непрерывный спектр». При увеличении ширины ямы уже при ≥ 50 Å появляются состояния с $n, n' \neq 1$ и при поляризации $e \parallel z$ также возникает поглощение (рис. 1, кривые 2, 3). Причем в спектре поглощения четко проявляется двумерная плотность состояний в квантовой яме.

В случае поляризации $e \perp z$ из-за зависимости матричного элемента от квазиимпульса k и правила отбора Δn — четный, двухфотонное поглощение существует при любых толщинах ямы a (рис. 2, кривые 1–3). Изломы на кривых поглощения соответствуют пороговым частотам включения новых подзон с $n, n' > 1$ в процесс двухфотонного поглощения.

Как известно, важным параметром теории полупроводниковых гетероструктур является отношение энергетических скачков в с- и v-зонах $\Delta E_c / \Delta E_v$, экспериментальные значения которого для многих типов гетероструктур часто неоднозначны и могут значительно отличаться друг от друга. С другой стороны, энергетические разрывы определяют глубины потенциальных ям и, соответственно, число двумерных подзон в каждой яме. Следовательно, как местоположение, так и само число пиков в спектре поглощения значительным образом зависят от параметра $\Delta E_c / \Delta E_v$. Это особенно заметно в случае поляризации $e \parallel z$, где каждый новый переход приводит к возникновению нового резкого пика в спектре. На рис. 3 приведены спектры поглощения в GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As при $a = 50$ Å, $e \parallel z$ для двух значений $\Delta E_c / \Delta E_v = 3$ и 1.5, часто рассматриваемых в литературе [3]. Как видно, пороги и

местоположение, а также число самих пиков отличаются, что дает возможность предложить новый метод для выбора наиболее реального отношения $\Delta E_c/\Delta E_v$ из имеющихся в литературе данных, основанный на исследовании двухфотонного поглощения. Действительно, из данных работы [3] нетрудно получить, что новый $(n+1)$ -ый уровень возникает, когда параметр U для данного типа частицы удовлетворяет условию $\sqrt{U} = \sqrt{V/E_0} = n$. Соответственно, при поляризации $e \parallel z$ число пиков в спектре поглощения, соответствующих значениям $V_1 \leq E_0 n^2$ и $V_2 \geq E_0 n^2$, будет отличаться на единицу. Таким образом, выбирая толщину слоя GaAs, удовлетворяющую условию $V_1 < E_0 n^2 < V_2$ и сравнивая число экспериментальных пиков с рассчитанными, можно осуществить выбор между параметрами V_1 и V_2 , что позволит определить наиболее реальное значение $\Delta E_c/\Delta E_v$.

Список литературы

- [1] H.N. Spector. Phys. Rev. B, **35**, 5876 (1987).
- [2] A. Pasquarello, A. Quattropani. Phys. Rev. B, **38**, 6206 (1988).
- [3] K. Tai, A. Mysyrowicz, R.J. Fisherm, R.E. Slusher, A.Y. Cho. Phys. Rev. Lett., **62**, 1784 (1989).
- [4] М.А. Хармен. Полупроводниковые сверхрешетки (М., Мир, 1989).
- [5] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках (М., Наука, 1972).
- [6] Е.Л. Ивченко. ФТТ, **14**, 3489 (1972).
- [7] С.Б. Арифжанов, Е.Л. Ивченко. ФТТ; **17**, 81 (1975).
- [8] P. Voisin, G. Bastard, M. Voss. Phys. Rev. B, **29**, 935 (1984).
- [9] R.C. Miller, P.A. Kleinman, A.C. Gossard. Phys. Rev. B, **32**, 7085 (1984).

Редактор В.В. Чалдышев

Two-photon absorption in a GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs multi-well quantum structure

S.K. Avetisyan, A.O. Melikyan, G.R. Minasyan

Armenian State Engineering University, Yerevan, Armenia