## Оптические межподзонные переходы в напряженных квантовых ямах на основе твердых растворов In<sub>1-*x*</sub>Ga<sub>*x*</sub>As/InP

© С.А. Стоклицкий, В.Н. Мурзин, Ю.А. Митягин, Б. Монемар\*, П.О. Хольц\*

Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук, 117924 Москва, Россия \* Linkuping University, S-58183 Linkuping, Sweden

(Получена 3 июня 1998 г. Принята к печати 5 июня 1998 г.)

Теоретически исследовано инфракрасное поглощение в напряженных квантовых ямах *p*-типа на основе структур  $In_{1-x}Ga_xAs/InP$  для обоих возможных типов деформаций (растяжения и сжатия). Обнаружено, что в условиях нормального падения поглощение существенно возрастает в случае деформации сжатия (когда основное состояние имеет тяжелодырочный характер) и уменьшается в случае деформации растяжения (основное состояние — легкодырочное). Пиковое поглощение в квантовой яме в условиях сжатия может достигать значительных величин порядка 5000 см<sup>-1</sup> при концентрации дырок ~  $10^{12}$  см<sup>-2</sup>, что делает привлекательным использование "сжатых" квантовых ям *p*-типа для детектирования ИК излучения.

#### 1. Введение

В последние годы интенсивно исследуются фундаментальные свойства и прикладные аспекты полупроводниковых квантово-размерных структур на основе соединений GaAs/AlGaAs, InGaAs/AlGaAs и InGaAs/InP [1-10]. Одно из перспективных прикладных направлений связано с использованием таких структур в качестве детекторов инфракрасного и дальнего инфракрасного излучения. Оптическое межподзонное поглощение в квантово-размерных структурах обусловлено переходами между локализованными состояниями в квантовой яме или между локализованным состоянием квантовой ямы и делокализованными состояниями выше квантового барьера. Традиционные квантово-размерные структуры *п*-типа [1–4] обладают такими привлекательными с точки зрения инфракрасного (ИК) детектирования свойствами, как малая масса носителя заряда и высокая подвижность. Однако квантово-механическое правило отбора в данном случае запрещает оптические переходы при нормальном падении света и требует наличия компоненты электрического поля, перпендикулярной к плоскости двумерного электронного газа (квантовой ямы). Для эффективного возбуждения электромагнитной волны с перпендикулярной поляризацией необходимо применение специальных методов, например создание структур на поверхности полупроводника (рифление или планарная металлическая решетка). В этом отношении более преспективными представляются квантово-размерные структуры р-типа, которым в последнее время уделяется все большее внимание [5–10]. Благодаря квантово-механическому смешиванию состояний легких и тяжелых дырок оптические переходы между состояниями в квантовых ямах с р-типа проводимостью разрешены для нормального падения электромагнитной волны, что облегчает создание детекторов ИК диапазона [11-14].

Так как энергетический спектр, волновые функции и матричные элементы оптических переходов дырочных состояний в квантовых ямах высокочувствительны к

деформациям кристаллической решетки [15,16], можно эффективно управлять ИК свойствами с помощью приложения внешнего одноосного сжатия или "встроенной" деформации (напряженные структуры). Эффекты встроенного напряжения, возникающего в результате рассогласования параметров решетки подложки и квантовой ямы, изучались теоретически [7,17] и экспериментально [10] в системах на основе GaInAs/AlInAs. В работе [7] было теоретически предсказано значительное увеличение инфракрасного поглощения в напряженной системе с составом Ga<sub>0.7</sub>In<sub>0.3</sub>As/Al<sub>0.48</sub>In<sub>0.52</sub>As, соответствующим растяжению материала квантовой ямы.

В данной работе теоретически исследовано влияние встроенного упругого напряжения на инфракрасное поглощение в квантовых ямах на основе  $In_{1-x}Ga_xAs/InP$ . Рассматриваются ситуации растяжения (x > 0.47) и сжатия (x < 0.47). В разд. 2 кратко описана теория квантовых дырочных состояний и ИК поглощения в напряженных квантовых ямах с учетом рассогласования параметров валентной зоны в материалах квантовой ямы и барьера. В разд. 3 представлены результаты численных расчетов матричных элементов оптических переходов для различных поляризаций света. Данные расчетов спектров поглощения ИК излучения обсуждаются в разд. 4, 5.

# 2. Энергетический спектр и оптические переходы в напряженных квантовых ямах

В данной работе рассматривается типичная напряженная структура (квантовая яма), образованная слоем полупроводникового материала (твердого раствора)  $\ln_{1-x}Ga_xAs$  с запрещенной зоной  $E_g(x) = 0.5-1.0$  эВ, расположенным между двумя барьерными диэлектрическими слоями из InP, характеризующегося существенно большей запрещенной зоной (1.4 эВ). Изменяя атомную долю галлия x в слое ямы, можно изменять физические параметры (в том числе постоянную решетки *a*)

и управлять деформацией, возникающей в области интерфейса  $In_{1-x}Ga_xAs/InP$  (точное соответствие параметров решеток ямы и барьера и, соответственно, нулевая деформация достигается при  $x \approx 0.47$ ). В дальнейшем предполагается, что упругое напряжение, созданное рассогласованием постоянных кристаллических решеток ямы  $a_w$  и  $a_b$ , полностью сосредоточено в слое квантовой ямы.

Для дальнейшего анализа выберем направление роста полупроводниковой структуры (перпендикулярно к плоскости слоев) за ось z. Энергии и волновые функции состояний валентной зоны могут быть получены с помощью решения системы уравнений в рамках метода эффективной массы [14-20]

$$\sum_{\nu} \left[ H_{\mu\nu} + V_h(z) \delta_{\mu\nu} \right] F_{\nu}(k_{\parallel}, z) = E(k_{\parallel}) F_{\mu}(k_{\parallel}, z), \quad (1)$$

где индексы  $\mu, \nu$  обозначают блоховские состояния  $|3/2, 3/2\rangle, |3/2, 1/2\rangle, |3/2, -1/2\rangle, |3/2, -3/2\rangle$ , cootbetственно,  $H_{\mu\nu}$  — матричный 4 × 4 гамильтониан Латтинджера и V<sub>h</sub>(z) — потенциал квантовой ямы. Поскольку потенциал квантовой ямы  $V_h(z)$  является функцией координат, волновой вектор  $k_z$  в уравнении (1) должен быть заменен оператором  $\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial z}$ . Компоненты волновых функций  $F_{\mu}(k_{\parallel}, \mathbf{r})$  имеет форму

$$F_{\mu}(\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{r}) = F_{\mu}(\mathbf{k}_{\parallel},z) \exp(i\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{r}_{\parallel}), \qquad (2)$$

где **k**<sub>||</sub> обозначает волновой вектор дырки в плоскости квантовой ямы.

Поскольку параметры тензора эффективной массы в (1) являются функциями координат, все операторы вида  $A(z)\frac{\partial^2}{\partial z^2}$  и  $B(z)\frac{\partial}{\partial z}$ , входящие в гамильтониан Латтинджера, должны быть заменены на симметризованные выражения  $\frac{\partial}{\partial z}A(z)\frac{\partial}{\partial z}$  и  $\frac{1}{2}(B(z)\frac{\partial}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial z}B(z))$  для обеспечения эрмитовости [22].

Мы применяем унитарное преобразование [18,20,15,16] для блочной 2 × 2 диагонализации исходного 4×4 гамильтониана Латтинджера. Используем также для простоты аксиальное (относительно оси z) приближение [18,20]. Преобразованный гамильтониан  $H_{\mu\nu}$  может быть записан в виде [15,16]

 $H_{\mu
u} = \begin{bmatrix} H^U & 0 \\ 0 & H^L \end{bmatrix},$ 

 $\begin{bmatrix} H_{i}^{U} & H_{i}^{U} \end{bmatrix}$ 

где

$$H^{U} = \begin{bmatrix} H^{U} & H^{12} \\ H^{U}_{21} & H^{U}_{22} \end{bmatrix},$$

$$H^{U}_{11} = \frac{\hbar^{2}}{2m_{0}} \times \left[ (\gamma_{1} + \gamma_{2})k_{\parallel}^{2} + \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z}(\gamma_{1} - 2\gamma_{2})\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z} + \xi \right],$$

$$H^{U}_{12} = \frac{\hbar^{2}}{2m_{0}} \times \left[ \sqrt{3}\gamma k_{\parallel}^{2} - i\sqrt{3}k_{\parallel} \left( \gamma_{3}\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z}\gamma_{3} \right) \right],$$

$$H^{U}_{21} = \frac{\hbar^{2}}{2m_{0}} \times \left[ \sqrt{3}\gamma k_{\parallel}^{2} + i\sqrt{3}k_{\parallel} \left( \gamma_{3}\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z}\gamma_{3} \right) \right],$$

$$H^{U}_{22} = \frac{\hbar^{2}}{2m_{0}} \times \left[ (\gamma_{1} - \gamma_{2})k_{\parallel}^{2} + \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z}(\gamma_{1} + 2\gamma_{2})\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z} + \xi \right],$$
(4)

$$H^{L} = \begin{bmatrix} H_{11}^{L} & H_{12}^{L} \\ H_{21}^{L} & H_{22}^{L} \end{bmatrix},$$

$$H_{11}^{L} = \frac{\hbar^{2}}{2m_{0}} \times \left[ (\gamma_{1} - \gamma_{2})k_{\parallel}^{2} + \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z}(\gamma_{1} - 2\gamma_{2})\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z} + \xi \right],$$

$$H_{12}^{L} = \frac{\hbar^{2}}{2m_{0}} \times \left[ \sqrt{3}\gamma k_{\parallel}^{2} - i\sqrt{3}k_{\parallel} \left( \gamma_{3}\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z}\gamma_{3} \right) \right],$$

$$H_{21}^{L} = \frac{\hbar^{2}}{2m_{0}} \times \left[ \sqrt{3}\gamma k_{\parallel}^{2} + i\sqrt{3}k_{\parallel} \left( \gamma_{3}\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z}\gamma_{3} \right) \right],$$

$$H_{22}^{L} = \frac{\hbar^{2}}{2m_{0}} \times \left[ (\gamma_{1} + \gamma_{2})k_{\parallel}^{2} + \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z}(\gamma_{1} + 2\gamma_{2})\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z} + \xi \right].$$
(5)

В случае напряженной квантовой структуры (например,  $In_{1-x}Ga_xAs$  с постоянной решетки a(x), выращенного на InP с постоянной решетки  $a_0$ ) энергия упругого напряжения ξ в уравнениях (5) может быть выражена через биаксиальную деформацию  $\varepsilon = \frac{a_0 - a(x)}{a(x)}$  как  $\xi = -b \left[ 1 + \frac{2c_{12}}{c_{11}} \right] \varepsilon$ . Потенциальная энергия дырки записывается в виде [15,16]

$$V_{h}(z) = \begin{cases} 2a_{\nu} \left(1 - \frac{c_{12}}{c_{11}}\right) \varepsilon & \text{энергия гидростатической} \\ & \text{деформации в области ямы, (6)} \\ \Delta E_{\nu} & \text{в области барьера,} \end{cases}$$

где  $\Delta E_V$  — высота квантового барьера.

 $\left[F_{1}(z)\right]$ 

И

(3)

Условия сшивания решений на границе между квантовой ямой и барьером могут быть получены с помощью интегрирования уравнений (1) в области вблизи интерфейса. Явные выражения для граничных условий заключаются в требовании непрерывности функций столбцов [15,16,22]

$$\begin{bmatrix} F_1(z) \\ F_2(z) \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} F_3(z) \\ F_4(z) \end{bmatrix}$$

(7)

$$\begin{bmatrix} (\gamma_{1} - 2\gamma_{2})\frac{\partial}{\partial z} & \sqrt{3}\gamma_{3}k_{\parallel} \\ -\sqrt{3}\gamma_{3}k_{\parallel} & (\gamma_{1} + 2\gamma_{2})\frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_{1}(z) \\ F_{2}(z) \end{bmatrix}, \\ \begin{bmatrix} (\gamma_{1} + 2\gamma_{2})\frac{\partial}{\partial z} & \sqrt{3}\gamma_{3}k_{\parallel} \\ -\sqrt{3}\gamma_{3}k_{\parallel} & (\gamma_{1} - 2\gamma_{2})\frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_{3}(z) \\ F_{4}(z) \end{bmatrix},$$
(8)

Коэффициент поглощения для оптических переходов между дырочными подзонами n и n' определяется выражением

$$\alpha_{nn'}(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{n_0 \omega c \Omega} \sum_{k_{\parallel}} \left[ f_n(k_{\parallel}) - f_{n'}(k_{\parallel}) \right] \\ \times \left| \left\langle n' | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{v}} | n \right\rangle \right|^2 \delta \left( E_{n'} - E_n - \hbar \omega \right), \quad (9)$$

где n<sub>0</sub> — индекс рефракции, **е** — вектор поляризации света,  $f_n(k_{\parallel})$  — дырочная функция распределения. В рамках приближения функций-огибающих оператор скорости дырки может быть определен как

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{k}}.$$
 (10)

Окончательный результат для компонент скорости может быть записан в виде

$$\hat{v}_{\parallel} = \begin{bmatrix} \hat{v}_{\parallel}^{U} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \hat{v}_{\parallel}^{L} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \hat{v}_{z}^{U} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \hat{v}_{z}^{L} \end{bmatrix},$$
(11)

где операторы  $v_{\parallel}^U, v_z^U$  имеют симметризованную эрмитовскую форму:

$$\begin{aligned} v_{\parallel}^{U} &= \frac{\hbar}{2m_{0}} \\ \times \begin{bmatrix} 2k_{\parallel}(\gamma_{1}+\gamma_{2}) & 2\sqrt{3}\bar{\gamma}k_{\parallel} - \sqrt{3}\frac{1}{i}\left(\gamma_{3}\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z}\gamma_{3}\right) \\ 2\sqrt{3}\bar{\gamma}k_{\parallel} + \sqrt{3}\frac{1}{i}\left(\gamma_{3}\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z}\gamma_{3}\right) & 2k_{\parallel}(\gamma_{1}-\gamma_{2}) \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

$$(12)$$

$$v_{z}^{U} = \frac{\hbar}{2m_{0}}$$

$$\times \begin{bmatrix} \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial z} (\gamma_{1} - 2\gamma_{2}) + (\gamma_{1} - 2\gamma_{2}) \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial z} & -i2\sqrt{3}\gamma_{3}k_{\parallel} \\ +i2\sqrt{3}\gamma_{3}k_{\parallel} & \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial z} (\gamma_{1} + 2\gamma_{2}) + (\gamma_{1} + 2\gamma_{2}) \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix}$$
(13)

и  $v_{\parallel}^L$ ,  $v_z^L$  — эрмитово сопряженны операторам  $v_{\parallel}^U$ ,  $v_z^U$  соответственно. Матричные элементы  $m_0 \langle n' | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{v}} | n \rangle$  могут быть записаны в виде [14]

$$m_{0}\mathbf{e}\hat{\mathbf{v}}_{nn'} = m_{0}\langle n'|\mathbf{e}\hat{\mathbf{v}}|n\rangle$$
$$= \mathbf{e}\sum_{\nu\nu\nu'} \left(\mathbf{P}_{\nu\nu'}O_{\nu\nu'}^{nn'} + \mathbf{Q}_{\nu\nu'}D_{\nu\nu'}^{nn'}\right), \qquad (14)$$

(15)

где коэффициенты матриц  $\mathbf{P}_{\nu\nu'}\mathbf{Q}_{\nu\nu'}$  могут быть получены непосредственно из (13) и (14). Элементы матрицы перекрытия  $O_{\nu\nu'}^{m'}$  и дипольной матрицы  $D_{\nu\nu'}^{m'}$  определяются как  $O_{\nu\nu'}^{nn'} = \int F_{\nu'}^* F_{\nu} dz$ 

$$D_{\nu\nu'}^{nn'} = \int F_{\nu'}^* \left( A(z) \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial z} A(z) F_{\nu} \right) dz$$
$$= \int A(z) \left( F_{\nu'}^* \frac{1}{i} \frac{\partial F_{\nu}}{\partial z} + F_{\nu} \left( \frac{1}{i} \frac{\partial F_{\nu'}}{\partial z} \right)^* \right) dz. \quad (16)$$

Отметим, что матрица  $\mathbf{P}_{\nu\nu'}$  линейна относительно  $k_{\parallel}$  и  $\mathbf{Q}_{\nu\nu'}$  не зависит от  $k_{\parallel}$  [14].

#### 3. Энергетический спектр дырок и матричные элементы оптических переходов в напряженных квантовых ямах

Физические параметры материалов GaAs, InAs InP, использованные в вычислениях, перечисле-И в таблице [15,16,27]. Все параметры матены

Физика и техника полупроводников, 1999, том 33, № 1

риалов для твердого раствора In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As вычислялись как линейная интерполяция параметров материалов InAs и GaAs, за исключением ширины запрещенной зоны для напряженного материала  $E_{e}(\text{In}_{1-x}\text{Ga}_{x}\text{As}) = 0.418 + 0.614x + 0.487x^{2} \Im B$  [15,16]. При анализе эффектов деформации в квантовых структурах трудно определяемой величиной является парциальное распределение упругих потенциалов и энергетических барьеров между валентной зоной и зоной проводимости. В данных вычислениях использовалась простая модель, описанная в [15,16]. Доля гидростатического потенциала, относящаяся к валентной зоне принималась за 1/3 ( $a_v = a/3$ ), а высота потенциального барьера для дырок  $\Delta E_v = 0.64 \Delta E_g$ . Энергетический спектр и волновые функции вычислялись с помощью метода матрицы распространения [15,16].

Физические параметры полупроводниковых материалов GaAs, InAs и InP

Параметр	GaAs	InAs	InP
Постоянная решетки $a$ , Å Запрещенная зона $E_g$ , эВ $\gamma_1$ $\gamma_2$ $\gamma_3$ $c_{11}$ , $10^{11}$ дин/см <sup>2</sup> $c_{12}$ , $10^{11}$ дин/см <sup>2</sup> a = a 2B	5.653 1.519 6.85 2.1 2.9 11.89 5.38	6.058 0.418 20.4 8.3 9.1 8.83 4.53 	5.869 1.424 4.95 1.65 2.35 10.11 5.61 -8.6
b, 3B	-1.7	-1.8	-2.0

На рис. 1, а, b показана вычисленная структура дырочных состояний для квантовой ямы (80 Å) с составом  $In_{1-x}Ga_xAs/InP$  при различных атомных долях Ga (x). Для ненапряжнной квантовой ямы первая дырочная подзона H1 является нижней, так как тяжелые дырки обладают большей эффективной массой в направлении оси роста структуры (квантово-размерный эффект). При возникновении сжатия (x < 0.47) энергии состояний тяжелых дырок понижаются, а легких — повышаются под действием сдвигового потенциала. Как видно из рис. 1, а, в этом случае эффективная масса нижнего состояния в плоскости квантовой ямы "облегчается".

В случае упруго растянутой структуры (x > 0.47) деформационный потенциал понижает энергию состояний легких дырок и повышает энергию состояний тяжелых дырок, "конкурируя" с квантово-размерным эффектом, приводя к сильному взаимодействию и смешиванию состояний нижних подзон H1 и L1 в "переходной" области составов ( $x \cong 0.5 - 0.6$ ). В результате возникает область отрицательных эффективных масс в плоскости квантовой ямы. При дальнейшем увеличении деформации растяжения подзона легких дырок становится основным состоянием, характеризуясь "тяжелой" массой в плоскости квантовой ямы.

Результаты расчетов вероятностей оптических переходов (квадратов модулей матричных элементов



**Рис. 1.** Структура валентной зоны  $E(k_{\parallel})$  для квантовой ямы шириной 80 Å In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As/InP, рассчитанная для различных составов: a - x = 0.47 (нет рассогласования параметров решетки для материалов барьера и квантовой ямы, x = 0.32 (деформация сжатия); b - 0.57, 0.67 (деформация растяжения). Состояния легких дырок промаркированы.



**Рис. 2.** Рассчитанные значения квадратов модулей дипольных матричных элементов  $\left(\frac{m_0}{2}\right) \left|\langle n|v_z|n'\rangle\right|^2$  для оптических переходов при *z*-поляризации при различных составах In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As/InP: *a* — *x* = 0.32 (сжатие); *b* — *x* = 0.47 (нет деформации); *c*, *d* — *x* = 0.57 (растяжение), 0.67 (растяжение). Ширина ямы — 80 Å.

Физика и техника полупроводников, 1999, том 33, № 1



**Рис. 3.** Рассчитанные значения квадратов модулей дипольных матричных элементов  $\binom{m_0}{2} |\langle n|v_z|n'\rangle|^2$  для оптических переходов *х*-поляризации при различных составах In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As/InP: a - x = 0.32 (сжатие); b - x = 0.47 (нет деформации); c, d - x = 0.57 (растяжение), 0.67 (растяжение). Ширина ямы — 80 Å.

 $m_0 \mathbf{e} \hat{\mathbf{v}}_{nn'} = m_0 \langle n' | \mathbf{e} \hat{\mathbf{v}} | n \rangle$  показаны на рис. 2 (вектор **e** параллелен оси **z**, *z* — поляризация) и рис. 3 (нормальное падение света, вектор **c** параллелен плоскости квантвой ямы, *x* — поляризация) как функция модуля волнового вектора  $k_{\parallel}$ . Результаты представлены только для переходов из основного состояния, так как обычно только это состояние заполнено в типичных экспериментальных условиях. Правила отбора для различных межподзонных переходов могут быть поняты из анализа уравнений (12)–(14). Вероятности переходов в области волновых векторов вблизи  $k_{\parallel} = 0$  определяются матричными элементами  $\mathbf{Q}_{\nu\nu'}$ .

Как можно видеть из рис. 2, 3, правила отбора сильно отличаются для различных поляризаций света. При малых значениях волнового сектора  $k_{\parallel}$  доминируют разрешенные по четности межподзонные переходы между состояниями *HH* и *LH* (*H*1  $\rightarrow$  *L*2 или *L*1  $\rightarrow$  *H*2, *H*4) в случае *х*-поляризации и внутризонные (*H*1  $\rightarrow$  *H*2, *H*1  $\rightarrow$  *H*4 или *L*1  $\rightarrow$  *L*2) в случае *z*-поляризации.

Матричные элементы межподзонных переходов значительно увеличиваются в случае, когда основное состояние является легкодырочным (в случае деформации растяжения), так как вероятность такого рода переходов обратно пропорциональна квадрату эффективной массы в *z*-направлении.

В случае *х*-поляризации, как видно из рис. 3, вероятности межподзонных переходов в области вблизи  $k_{\parallel} = 0$  значительно увеличиваются, если основное состояние является тяжелодырочным. Это свойство связано с различной степенью проникновения в область квантового барьера волновых функций основного состояния легких и тяжелых дырок  $F_{\nu}(z)$ . Как можно видеть из рис. 4, волновая функция легких дырок значительно "плавнее", что определяет меньшие значения дипольных матричных элементов  $D_{\nu\nu'}^{mn'}$ .

По мере роста волнового вектора  $k_{\parallel}$  состояния тяжелых и легких дырок смешиваются, и переходы между любыми состояниями становятся возможными. При до-



**Рис. 4.** Рассчитанные волновые функции для нижних состояний тяжелых и легких дырок в ненапряженной квантовой яме  $In_{1-x}Ga_xAs/InP$ , x = 0.47,  $k_{\parallel} = 0$ , w = 80 Å.

статочно больших значениях  $k_{\parallel}$  обе матрицы  $\mathbf{P}_{\nu\nu'}$  и  $\mathbf{Q}_{\nu\nu'}$ дают вклад в вероятность переходов. Рассматривая важный случай нормального падения света (х-поляризация), можно заметить, что все вероятности переходов значительно увеличиваются в случае сжатия (содержание Ga x < 0.47), когда основное состояние является тяжелодырочным. Напротив, величины матричных элементов оптических переходов уменьшаются в случае растяжения (x > 0.47), когда основное состояние является легким. Как можно видеть из рис. 3, с, вероятности переходов имеют особенно маленькие значения в диапазоне составов  $x \cong 0.5-0.6$ , когда нижнее состояние является сильно смешанным. Описанный эффект влияния напряжения на оптические переходы может быть понят с учетом изменения эффективной массы в плоскости квантовой ямы. Так как вероятность переходов w<sub>nn'</sub> для *х*-поляризации определяется матричными элементами  $\langle n' | \mathbf{e} \cdot \hat{v}_x | n \rangle$ , можно записать в первом приближении  $w_{nn'}(k_{\parallel}) \sim v_{xn}(k_{\parallel}) = \frac{\partial E_n(k_{\parallel})}{\partial k_{\parallel}}$ . В самом деле, из сравнения рис. 3, 2 с рис. 1 можно видеть, что высокие вероятности переходов соответствуют большим значениям обратной эффективной массы  $\frac{\partial E_1(k_{\parallel})}{\partial k_{\parallel}}$  в случае деформации сжатия (основное состояние — тяжелодырочное) и низкие вероятности переходов — малым значениям  $\frac{\partial E_1(k_{\parallel})}{\partial k_{\parallel}}$  в случае деформации растяжения (основное состояние легкодырочное).

Дисперсия основного состояния  $\frac{\partial E_1(k_{\parallel})}{\partial k_{\parallel}}$  особенно мала при сильном смешивании нижних состояний ( $x \sim 0.5-0.6$ ), что приводит к резкому ослаблению поглощения света при нормальном падении. Отметим также два других фактора, существенно влияющих на интенсивность дырочного межподзонного оптического поглощения в системе InGaAs: увеличение значений параметров Латтинджера и глубины квантовой ямы с

ростом доли In (1 - x) ( $\Delta E_v = 390$  мэВ для x = 0.47 и  $\Delta E_v = 486$  мэВ для x = 0.32).

Таким образом, интенсивность оптических межподзонных переходов в напряженных квантовых ямах значительно увеличивается для *х*-поляризации (нормальное падение света), когда основное состояние является тяжелодырочным, и для *z*-поляризации, когда основное состояние является легкодырочным.

#### Спектры межподзонного поглощения в напряжнной квантовой яме In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As/InP

Для определения коэффициента поглощения необходимо просуммировать интенсивности переходов между отдельными подзонами *m* и *n*:

$$\alpha(\omega) = \sum_{m,n} \alpha_{mn}(\omega). \tag{17}$$

В данной работе мы рассматриваем для простоты случай нулевой температуры, принимая значение функции распределения в уравнении (9)  $f(k_{\parallel}) = 1 \ E < E_f$  и  $f(k_{\parallel}) = 0$  для  $E > E_f$ .  $\delta$ -функция в уравнении (9) заменялась при вычислениях нормализованной Лоренцовой функцией [14,7,8]  $\delta(E) = (\Gamma/2\pi)(E^2 + \Gamma^2/4)^{-1}$  с типичной шириной контура  $\Gamma = 8$  мэВ. С целью исследования эффектов напряжения были рассчитаны спектры нормального падения для 80 Å квантовой ямы In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As/InP при различных значениях параметра *x*. При выполнении интегрирования по  $k_{\parallel}$  двумерная плотность дырок в квантовой яме предполагалась фиксированной и равной 10<sup>12</sup> см<sup>-2</sup>.

Вычисленные спектры нормального падения для различных составов системы In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As представлены на рис. 5, *a* и *b*. В случае ненапряженной (x = 0.47) и сжатой решетки (x < 0.47) (см. рис. 5, a) спектры выглядят аналогично и доминирующими переходами являются  $H1 \rightarrow H3~(h
u~\sim~100\,{
m M}{
m 9B})$  и  $H1 \rightarrow L2$  $(h\nu ~\sim~ 200{-}300\,{
m M}$ эВ). При увеличении сжатия поглощение в важном с точки зрения приложений спектральном диапазоне  $h\nu \sim 100$  мэВ ( $\lambda \sim 10$  мкм) зрачительно возрастает, что обусловлено возрастанием дипольных матричных элементов оптических переходов (см. предыдущий параграф). Как видно из рис. 5, а, пиковый коэффициент поглощения достигает значений  $\alpha L \sim 0.005$ , что соответствует значительной величине объемного поглощения  $\alpha = \frac{\alpha L}{L} \sim 6000 \, \mathrm{сm}^{-1}$ . Сильный сдвиг доминирующего пика  $H1 \rightarrow L2$  в сторону высоких частот обусловлен увеличением энергетического зазора между тяжелой и легкой подзонами.

Картина радикально меняется в случае деформации растяжения (x > 0.47). Как видно из рис. 5, b, общее инфракрасное поглощение в сильно растянутой квантовой яме (x = 0.67) значительно ниже, чем в недеформированной структуре в соответствии с меньшими значениями оптических матричных элементов



**Рис. 5.** Спектры оптического поглощения в квантовой яме при нормальном падении для различных составов  $In_{1-x}Ga_xAs/InP$  при T = 0 K. a - x = 0.47 (ненапряженная решетка); x = 0.42, 0.37 0.32 (сжатие); b - x = 0.47 (ненапряженная решека); x = 0.52, 0.57, 0.67 (растяжение). Концентрация дырок постоянна и равна  $10^{12}$  см<sup>-2</sup>.

(см. рис. 3, *d*). Как видно из рис. 3, *c*, вероятности оптических переходов особенно сильно уменьшаются в случае небольших растяжений (x = 0.5-0.6). Наблюдаемый эффект, очевидно, обусловлен сильным взаимодействием и смешиванием нижних дырочных состояний *L*1 и *H*1 (эффект "антипересечения", см. рис. 1, *b*), приводящим к значительному падению величины оптических матричных элементов (см. предыдущий раздел). Более того, сильное смешивание дырочных состояний приводит к электронноподобной эффективной массе вблизи начала координат в *k*-пространстве [21,15,16]. Вследствие этого при низких температурах дырки занимают нижайшие энергетические состояния при ненулевых значениях волнового вектора  $k_{\parallel} \sim 0.03-0.04$  (Å)<sup>-1</sup>, где значения матричных элементов значительно меньше, чем при  $k_{\parallel} \sim 0.6$  При дальнейшем увеличении растяжения (x > 0.6)



**Рис. 6.** Спектры нормального падения для различных составов квантовой ямы состава  $In_{1-x}Ga_xAs/InP$  при T = 0 К. a - x = 0.47 (ненапряженная решека); x = 0.37, 0.32 (сжатие); b - x = 0.47 (ненапряженная решека); x = 0.57, 0.67 (растяжение). Уровень Ферми постоянен и равен 6 мэВ.

основное состояние становится чисто легкодырочным и доминирующими переходами становятся  $L1 \rightarrow H3$  и  $L1 \rightarrow H4$ .

Обсуждаемые выше результаты получены в предположении постоянной двумерной плотности дырок ( $10^{12}$  см<sup>-2</sup>). В некоторых работах влияние деформации на оптическое поглощение анализировалось в предположении фиксированного уровня Ферми [7]. Чтобы сопоставить результаты двух различных подходов в данной работе были выполнены также расчеты коэффициента поглощения при фиксированном значении энергии уровня Ферми дырок (6 мэВ), соответствующем вариации двумерной плотности дырочного газа в диапазоне  $10^{11}-10^{12}$  см<sup>-2</sup> (рис. 6). Как видно из рис. 6, *b*, при фиксации уровня Ферми инфракрасное поглощение в растянутой квантовой яме значительно возрастает при

энергиях фотона порядка 100 мэВ, что идентично результатам работы [7]. Очевидно, что наблюдаемое возрастание поглощения связано с увеличением плотности состояний нижней подзоны легких дырок (см. рис. 1, b) (при фиксированном значении уровня Ферми 6 мэВ изменение атомной доли Ga от 0.47 до 0.67 соответствует увеличению концентрации дырок  $n_h$  от  $2.5 \cdot 10^{11}$  см<sup>-2</sup> до  $2.2 \cdot 10^{12} \,\mathrm{cm}^{-2}$ ). Таким образом, сравнение спектров поглощения, вычисленных при фиксированном уровне Ферми, отражает главным образом значительное изменение плотности состояний нижней дырочной подзоны. Поскольку в типичных квантовых структурах, созданных для инфракрасных приложений, концентрация дырок определяется уровнем легирования области квантовой ямы и не зависит от величины встроенной деформации, анализ спектров поглощения, вычисленных при фиксированной концентрации дырок, представляется более уместным.

Расчеты спектров поглощения, выполненные для различных фиксированных концентраций дырок в диапазоне  $n_h = 10^{10} - 10^{12} \text{ см}^{-2}$  и уровней Ферми  $E_f = 5 - 20 \text{ мэВ}$ , показали качественно такие же зависимости от деформации, как представлено выше.

#### 5. Заключение

В данной работе теоретически исследовано инфракрасное поглощение в напряженных квантовых ямах *p*-типа на основе  $In_{1-x}Ga_xAs/InP$ -структур для обоих возможных типов деформаций (растяжения и сжатия). Обнаружено, что в условиях нормального падения поглощения существенно возрастает в случае деформации сжатия (когда основное состояние имеет тяжелодырочный характер характер) и уменьшается в случае деформации растяжения (основное состояние — легкодырочное). Пиковое поглощение в квантовой яме в условиях сжатия может достигать значительных величин порядка 5000 см<sup>-1</sup> при концентрации дырок ~  $10^{12}$  см<sup>-2</sup>, что делает привлекательным использование "сжатых" квантовых ям *p*-типа для детектирования ИК излучения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (№ 96-02-18593) и межотраслевой научно-технической программы ФТНС (№ 97-1048).

#### Список литературы

- B.F. Levine, R.J. Malik, J. Walker, K.K. Choi, C.G. Bethea, D.A. Kleinman, J.M. Vandenberg. Appl. Phys. Lett., 50, 273 (1987).
- [2] L.S. Yu, S.S. Li. Appl. Phys. Lett., 59, 1332 (1991).
- [3] G. Hasnain, B.F. Levine, C.G. Bethea, R.A. Logan, J. Walker, R.J. Malik. Appl. Phys. Lett., 54, 2515 (1989).
- [4] J.Y. Andersson, L. Lundqvist. J. Appl. Phys., 71, 3600 (1992).
- [5] B.F. Levine, S.D. Gunapala, J.M. Kuo, S.S. Pei, S. Hui. Appl. Phys. Lett., 59, 1864 (1991).

- [6] S.D. Gunapala, B.F. Levin, D. Ritter, R. Hamm, M.B. Panish. J. Appl. Phys., 71, 2458 (1992).
- [7] H. Xie, J. Katz, W.I. Wang. Appl. Phys. Lett., 59, 3601 (1991).
- [8] H. Xie, J. Katz, W.I. Wang, Y.C. Chang. J. Appl. Phys., 71, 2844 (1992).
- [9] J. Katz, Y. Zhang. W.L. Wang. Electron. Lett., 28, 932 (1992).
- [10] Y.H. Wang, Sheng S. Li, J. Chu, Pin Ho. Appl. Phys., Lett., 64, 727 (1994).
- [11] P. Man, D.S. Pan. Appl. Phys. Lett., 61, 2799 (1992).
- [12] L.C. Chiu, J.S. Smith, S. Margalit, A. Yariv, A.Y. Cho. Infr. Phys., 23, 93 (1983).
- [13] A. Pinczuk, D. Heiman, R. Sooryakuman, A.C. Gossard, W. Wiegmann. Surf. Sci., 170, 573 (1986).
- [14] Y.C. Chang, R.B. James. Phys. Rev. B, 39, 12672 (1989).
- [15] S.L. Chuang. Phys. Rev. B, 43, 9649 (1991).
- [16] C.Y.-P. Chao, S.L. Chuang. Phys. Rev. B, 46, 4110 (1992).
- [17] S.A. Stoklisky, P.O. Holtz, B. Monemar, Q.X. Zhao, T. Lundstrom. Appl. Phys. Lett., 65, 1706 (1994).
- [18] J.M. Luttinger, W. Kohn. Phys. Rev., 97, 869 (1955).
- [19] D.A. Broido, L.J. Sham. Phys. Rev., B, 31, 888 (1985).
- [20] M. Altarelli, U. Ekenberg, A. Fasolino. Phys. Rev. B, 32, 5138 (1985).
- [21] R. Eppenga, M.F.H. Schuurmans, S. Colak. Phys. Rev. B, 36, 1554 (1987).
- [22] A. Twardowsky, C. Herman. Phys. Rev. B, 35, 8144 (1987).
- [23] L.C. Andreani, A. Pasquareloo, F. Bassani. Phys. Rev. B, 36, 5887 (1987).
- [24] R. Eppenga, M.F.H. Schuurmans, S. Colak. Phys. Rev. B, 36, 1554 (1987).
- [25] K. Suzuki, J.C. Hensel. Phys. Rev. B, 9, 4184 (1974).
- [26] A.G. Petrov, A. Shik. Phys. Rev. B, 48, 11883 (1993).
- [27] Numerical Data and Functional Relathionship in Science and Technology, ed. by K.-H. Hellwege, Landolt–Bornstein, New Series, Group III (Springer, Berlin, 1982) vol. 17A; Groups III–V (Springer, Berlin, 1986) vol. 22a.

Редактор В.В. Чалдышев

### Optical intersubband transitions in strained $In_{1-x}Ga_xAs/InP$ quantum wells

S.A. Stoklisky, V.N. Murzin, Yu.A. Mityagin, B. Monemar\*, P.O. Holtz\*

P.N. Lebedev Physical Institute, Russian Academy of Sciences.

117924 Moscow, Russia

\* Linkuping University,

S-581183 Linkuping, Sweden

**Abstract** The infrared absorption strain effects in *p*-type  $In_{1-x}Ga_xAs/InP$  quantum wells are investigated theoretically for both tensile and compressive types of deformation. It is shown that the normal incidence makes the absorption substantially increase in the case of the compressive strain (the ground state being the heavy hole) and decrease in the case of the tensile strain (the ground state being the light hole). The peak of the normal incidence absorption in the compressive strained *QW* can amount to values of order of 5000 cm<sup>-1</sup> for the hole density  $10^{12}$  cm<sup>-2</sup>, which makes rather attractive the use of the "compressed" *p*-type quantum wells as detectors of *IR* radiation.