

ОПТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ НА ПОЛУПРОВОДНИКОВОМ ИНТЕРФЕЙСЕ ТИПА II В ЭМПИРИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

*Е. Л. Ивченко**, *М. О. Нестоклон***

*Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук
194021, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 17 сентября 2001 г.

Построена теория сильной связи в многослойных полупроводниковых гетероструктурах типа II, в которых состояния электронов и дырок размерно квантованы в соседних слоях и перекрываются в узкой области вблизи интерфейса. Главное внимание уделяется расчету линейной поляризации фотолюминесценции, обусловленной анизотропией химических связей на идеальном интерфейсе, при излучении вдоль оси роста. Выведено выражение для матричного элемента оптического перехода на интерфейсе типа II при произвольной поляризации излучаемого фотона. Рассмотрение проведено в рамках sp^3 -модели сильной связи. Проанализировано, как влияют на линейную поляризацию фотолюминесценции интерфейсные параметры сильной связи, рассматриваемые в качестве свободных параметров. Теория допускает гигантскую линейную поляризацию фотолюминесценции, обнаруженную в гетероструктуре ZnSe/BeTe, и предсказывает, что плоскость поляризации, как правило, совпадает с плоскостью, в которой лежат химические связи на гетеропереходе.

PACS: 73.21.-b, 78.67.-n

1. ВВЕДЕНИЕ

В кристаллах кубической симметрии тензор второго ранга изотропен. Поэтому оптические свойства таких кристаллов без учета эффектов пространственной дисперсии и нелинейной восприимчивости также изотропны. В частности, коэффициент поглощения света не зависит от направления распространения и состояния поляризации световой волны, а фотолюминесценция не поляризована (в пренебрежении эффектами оптической памяти). Гетероструктура, выращенная на основе кубических композиционных материалов, обладает одноосной анизотропией по отношению к оси роста, но возникает ли при этом латеральная анизотропия, т. е. анизотропия в плоскости интерфейсов, не столь очевидно. Пусть композиционные материалы SA и C'A' имеют кристаллическую решетку цинковой обманки (кристаллический класс T_d) и гетероструктура SA/C'A' выращена в направлении [001]. Здесь сим-

волы C, C' и A, A' обозначают соответственно катионы и анионы. В монокристалле SA каждый атом, катион или анион, находится в тетраэдрическом окружении атомов другого сорта, откуда и следует тетраэдрическая симметрия всего кристалла в целом. Для атома на идеальном интерфейсе в гетероструктуре, например, атома A две тетраэдрические химические связи имеют вид C'-A и лежат в одной из плоскостей {110}, скажем, в плоскости (110), а две другие связи A-C лежат в ортогональной плоскости (1 $\bar{1}$ 0). Поэтому интерфейс SA/C'A' характеризуется точечной группой C_{2v} , включающей поворотную ось $C_2 \parallel [001]$ и зеркальные плоскости (1 $\bar{1}$ 0), (110). Эти плоскости неэквивалентны, так как при $C' \neq C$ неэквивалентны указанные две пары химических связей C'-A и A-C. Ясно, что ответ на вопрос о латеральной анизотропии зависит от того, как на физические свойства гетероструктуры влияет поведение электронной волновой функции в интерфейсной области, занимаемой нестандартными атомными плоскостями, у которых соседние атомные плоскости слева и справа различаются составом.

*E-mail: ivchenko@coherent.ioffe.rssi.ru

**E-mail: nestoklon@coherent.ioffe.rssi.ru

В структурах типа I с общим катионом ($C=C'$) или анионом ($A=A'$) интерфейсы, ограничивающие гетерослой слева и справа, например, интерфейсы $CA/C'A'$ и $C'A'/CA$ для гетерослоя CA , связаны зеркально-поворотным элементом точечной симметрии S_4 с центром преобразования в середине этого слоя. Поскольку преобразование S_4 меняет местами плоскости $(1\bar{1}0)$ и (110) , в таких структурах латеральная анизотропия, наводимая одним интерфейсом, компенсируется вкладом другого интерфейса. Однако для гетеропар без общего катиона и аниона ($C \neq C'$, $A \neq A'$) левый и правый интерфейсы могут быть несимметричными, если для одного из них переход от слоя CA к слою $C'A'$ осуществляется, например, через химическую связь $C'-A$ в последовательности атомных плоскостей $-C'-A'-C' \sim A-C-A-$, а переход $CA/C'A'$ — через связь $C-A'$ в последовательности $-C-A-C \sim A'-C'-A'$ (нестандартная химическая связь указана символом \sim). Латеральная оптическая анизотропия структур с квантовыми ямами типа I без общего атома стала предметом активных теоретических и экспериментальных исследований пять лет назад и продолжает вызывать повышенный интерес (см. [1–5] и цитируемую там литературу). Для кубических полупроводников A_3B_5 и A_2B_6 главным механизмом анизотропии является смешивание на интерфейсах (001) состояний тяжелых (hh) и легких (lh) дырок при нормальном падении. Ранее смешивание hh – lh привлекалось для объяснения тонкой структуры экситонных уровней в сверхрешетках GaAs/AlAs [6]. В структурах типа I типичная оценка для наблюдаемой латеральной анизотропии составляет 10 % в относительных единицах (например, для отношения разности коэффициентов оптического поглощения в поляризациях $[1\bar{1}0]$ и $[110]$ к их сумме).

Анализ поляризации краевой фотолуминесценции гетероструктур типа II [7–14] показал, что для них оптическая анизотропия, оцениваемая по степени линейной поляризации, составляет несколько десятков процентов и может достигать 70–80 %. Напомним, что в гетеропаре $CA/C'A'$ типа II, по определению, дно зоны проводимости ниже в одном материале, например $C'A'$, а потолок валентной зоны выше в другом материале, CA . Поэтому волновая функция электрона испытывает размерное квантование в слое $C'A'$ и экспоненциально затухает в примыкающих слоях CA , а дырки — наоборот. Так как матричный элемент процесса межзонной излучательной рекомбинации пропорционален перекрытию электронной и дырочной волновых функций, то при достаточно больших разрывах зон

на интерфейсе, когда туннельные хвосты затухают очень быстро, вклад в интеграл перекрытия вносит небольшая область, примыкающая к интерфейсу. В результате сильно возрастает значение волновой функции свободного носителя в интерфейсной области, где направления $[1\bar{1}0]$ и $[110]$ неэквивалентны, чем и объясняется гигантская линейная поляризация фотолуминесценции в многослойных образцах ZnSe/BeTe [11]. О том, что эта поляризация обусловлена не дефектами, скопившимися на интерфейсах, или, по крайней мере, не только ими свидетельствует ее стабильность к изменению температуры, приложению внешнего электрического поля и увеличению интенсивности возбуждающего света, приводящему к росту интенсивности фотолуминесценции на много порядков [12].

Основной целью данной работы является построение теории сильной связи для расчета межзонных оптических переходов на гетеропереходе II рода, когда метод плавных огибающих (или метод эффективной массы) неприменим. С учетом экспериментов [10–13] на примере простейшей sp^3 -модели выясняется, допускает ли теория гигантскую линейную поляризацию фотолуминесценции при таких переходах. В следующем разделе кратко сформулирована процедура расчета энергетического спектра и электронных состояний в методе сильной связи. В разд. 3 и 4 выведены формулы для коэффициента отражения электрона на интерфейсе и установлена связь между коэффициентом отражения и энергией размерного квантования электронов или дырок. В разд. 5 выведено выражение для межзонного матричного элемента оптического перехода в sp^3 -модели. Разделы 6 и 7 посвящены изложению результатов расчета, обсуждению и выводам.

2. ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В sp^3 -МЕТОДЕ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

Рассматривается периодическая гетероструктура $CA/C'A'$, выращенная вдоль оси $[001]$ и состоящая из чередующихся слоев бинарных соединений CA и $C'A'$ с различными катионами и анионами. Электронная волновая функция в методе сильной связи записывается в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n,\alpha} C_n^{\alpha b} \phi_{n\alpha}(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Здесь $\phi_{n\alpha}(\mathbf{r})$ — планарные орбитали, n — номер атомной плоскости, α — индекс орбитального состояния. Для состояний с нулевым латеральным вол-

новым вектором, т. е. состояний с $k_x = k_y = 0$, планарные орбитали связаны с ортогонализированными атомными орбиталями Φ_α^b соотношением

$$\phi_{n\alpha} = \sum_{n_1, n_2} \Phi_\alpha^b(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n - n_1 \mathbf{o}_1 - n_2 \mathbf{o}_2),$$

где n_1, n_2 — любые целые числа, $\mathbf{o}_1 = (a_0/2)(1, 1, 0)$, $\mathbf{o}_2 = (a_0/2)(1, -1, 0)$, a_0 — постоянная границентрированной кубической решетки, \mathbf{a}_n — положение какого-либо атома на n -й плоскости. Расстояние между соседними катионными и анионными плоскостями равно $a_0/4$. Ортогонализированные атомные орбитали Φ_α^b введены Левдиным [15] и в настоящее время широко используются при расчетах электронных состояний в методе сильной связи (см. [16, 17] и цитируемую там литературу¹⁾). В дальнейшем мы выбираем следующую нумерацию атомных плоскостей: четные значения n пробегает анионные плоскости, а нечетные значения — катионные плоскости. Для бóльшей ясности коэффициенты разложения в (1) снабжаются дополнительным индексом $b = a$ для аниона ($n = 2l$, l — целое число) и $b = c$ для катиона ($n = 2l + 1$). В методе сильной связи волновое уравнение движения электрона с энергией E заменяется системой линейных уравнений для коэффициентов C_n^{ab} :

$$(E_n^{ab} - E) C_n^{ab} + \frac{1}{2} \sum_{n' \neq n, \alpha'} V_{n, n'}^{ab, \alpha' b'} C_{n'}^{\alpha' b'} = 0. \quad (2)$$

Здесь E_n^{ab} — одноатомные энергии, $V_{n, n'}^{ab, \alpha' b'} = V_{n', n}^{\alpha' b', ab}$ — недиагональные параметры сильной связи для пары n, n' .

В sp^3 -методе сильной связи учитываются атомные s - и p -орбитали, поэтому пара индексов α, b пробегает восемь различных значений: $sa, sc, p_x'a, p_x'c, p_y'a, p_y'c, p_z'a, p_z'c$. Для удобства мы выбираем те орбитали $p_x \parallel [100]$ и $p_y \parallel [010]$, а орбитали

$$p_{x'} = \frac{p_x - p_y}{\sqrt{2}}, \quad p_{y'} = \frac{p_x + p_y}{\sqrt{2}},$$

ориентированные вдоль осей $[1\bar{1}0]$ и $[110]$.

Рассмотрим сначала систему уравнений (2) для однородного полупроводникового кристалла. При $k_x = k_y = 0$ эта система разбивается на три независимые подсистемы: для s - и p_z -орбиталей, для

$p_{x'}$ -орбиталей и $p_{y'}$ -орбиталей. В приближении взаимодействия ближайших соседей, которое в дальнейшем и используется, первую из подсистем можно привести к виду

$$(E_{sc} - E) C_{2l-1}^{sc} + \frac{1}{2} (V_{ss} C_{2l-2}^{sa} + V_{ss} C_{2l}^{sa} - V_{sc, pa} C_{2l-2}^{p_z'a} + V_{sc, pa} C_{2l}^{p_z'a}) = 0, \quad (3a)$$

$$(E_{pc} - E) C_{2l-1}^{p_z'c} + \frac{1}{2} (V_{xx} C_{2l-2}^{p_z'a} + V_{xx} C_{2l}^{p_z'a} + V_{pc, sa} C_{2l-2}^{sa} - V_{pc, sa} C_{2l}^{sa}) = 0, \quad (3б)$$

$$(E_{sa} - E) C_{2l}^{sa} + \frac{1}{2} (V_{ss} C_{2l-1}^{sc} + V_{ss} C_{2l+1}^{sc} - V_{sa, pc} C_{2l-1}^{p_z'c} + V_{sa, pc} C_{2l+1}^{p_z'c}) = 0, \quad (3в)$$

$$(E_{pa} - E) C_{2l}^{p_z'a} + \frac{1}{2} (V_{xx} C_{2l-1}^{p_z'c} + V_{xx} C_{2l+1}^{p_z'c} + V_{pa, sc} C_{2l-1}^{sc} - V_{pa, sc} C_{2l+1}^{sc}) = 0, \quad (3г)$$

где диагональные энергии и параметры $V_{ss}, V_{xx}, V_{xy}, V_{sa, pc} = V_{pc, sa}, V_{sc, pa} = V_{pa, sc}$ определены согласно [16]. Зависимость энергии E от волнового вектора электрона $\mathbf{k} = (0, 0, k)$ для орбитальных ветвей s - p_z получается путем приравнивания нулю определителя

$$\begin{vmatrix} E_{sa} - E & V_{ss} \cos \phi & 0 & iV_{sa, pc} \sin \phi \\ V_{ss} \cos \phi & E_{sc} - E & iV_{sc, pa} \sin \phi & 0 \\ 0 & -iV_{sc, pa} \sin \phi & E_{pa} - E & V_{xx} \cos \phi \\ -iV_{sa, pc} \sin \phi & 0 & V_{xx} \cos \phi & E_{pc} - E \end{vmatrix} = 0, \quad (4)$$

где $\phi = ka_0/4$. Уравнение (4) приводится к виду

$$A \cos^4 \phi + B \cos^2 \phi + C = 0, \quad (5)$$

$$A = (V_{ss} V_{xx} + V_{sa, pc} V_{sc, pa})^2, \quad B = D_1 D_2 - A - C, \\ C = D_3 D_4,$$

$$D_1 = (E_{sa} - E)(E_{sc} - E) - V_{ss}^2, \\ D_2 = (E_{pa} - E)(E_{pc} - E) - V_{xx}^2, \\ D_3 = (E_{sa} - E)(E_{pc} - E) - V_{sa, pc}^2, \\ D_4 = (E_{sc} - E)(E_{pa} - E) - V_{sc, pa}^2.$$

Из (5) находим

$$\cos^2 \phi = \frac{-B \pm \sqrt{B^2 - 4AC}}{2A}, \\ \cos \frac{ka_0}{2} = f(E) \equiv \frac{-(A + B) \pm \sqrt{B^2 - 4AC}}{A}. \quad (6)$$

¹⁾ Заметим, что в статье [16] в формуле, связывающей ортогонализированные атомные орбитали (см. ссылку [14] на стр. 374 указанной статьи) имеется опечатка: вместо матричного элемента $S^{-1}(nb\mathbf{R}_i; mb'\mathbf{R}_j)$ должно стоять $S^{-1/2}(mb'\mathbf{R}_j; nb\mathbf{R}_i)$.

В Γ -точке зоны Бриллюэна $\phi = 0$ и уравнение (5) принимает вид $D_1 D_2 = 0$. Два корня уравнения $D_1 = 0$ определяют энергию блоховских состояний симметрии Γ_1 , одно из которых, Γ_1^v , лежит глубоко в валентной зоне, а другое, Γ_1^c , — в зоне проводимости. Корни уравнения $D_2 = 0$ определяют положение потолка валентной зоны Γ_{15}^v и энергию состояния Γ_{15}^c , которое лежит в зоне проводимости.

В слоях конечной толщины нужно учитывать решения со всеми (включая комплексные) значениями k , которые удовлетворяют уравнению (5) для заданного значения энергии E (всегда вещественно). В [18] такие решения разделяются на четыре категории комплексной зонной структуры: 1) вещественные значения k , 2) мнимые k , 3) $k = 2\pi/a_0 + ik''$, $k'' = \text{Im } k \neq 0$, 4) $k = k' + ik''$, $k' = \text{Re } k \neq 0, \pm 2\pi/a_0, k'' \neq 0$. Из (6) следует, что решения относятся к категориям 1–3, если величина $B^2 - 4AC$ положительна и соответственно 1) $|f| < 1$, 2) $f > 1$, 3) $f < -1$, и к категории 4, если $B^2 - 4AC < 0$.

Подсистема для $p_{x'}$ -орбиталей имеет вид

$$\begin{aligned} U_+ C_{2l-1}^{p_{x'}c} + (E_{pa} - E) C_{2l}^{p_{x'}a} + U_- C_{2l+1}^{p_{x'}c} &= 0, \\ U_- C_{2l-2}^{p_{x'}a} + (E_{pc} - E) C_{2l-1}^{p_{x'}c} + U_+ C_{2l}^{p_{x'}a} &= 0, \end{aligned} \quad (7)$$

где $U_{\pm} = (V_{xx} \pm V_{xy})/2$. Уравнения для $p_{y'}$ -орбиталей получаются из (7) заменой U_{\pm} на U_{\mp} . Заметим, что в пренебрежении спином и спин-орбитальным взаимодействием переход от электронного представления к дырочному осуществляется заменой знака у энергии E и всех параметров сильной связи $V_{n,n'}^{\alpha b, \alpha' b'}$, а также комплексным сопряжением коэффициентов $C_n^{\alpha b}$. В однородном полупроводнике дисперсию орбитальных ветвей $p_{x'}$ или $p_{y'}$ можно привести к виду

$$\begin{aligned} E(k) &= \frac{E_{pc} + E_{pa}}{2} \pm R, \\ R &= \sqrt{D^2 + V(k)V(-k)}, \end{aligned} \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} D &= \frac{E_{pc} - E_{pa}}{2}, \\ V(k) &= U_+ \exp\left(\frac{ika_0}{4}\right) + U_- \exp\left(-\frac{ika_0}{4}\right), \\ U_{\pm} &= \frac{V_{xx} \pm V_{xy}}{2}. \end{aligned}$$

В этом случае решения относятся только к первым трем категориям. На рис. 1а изображена комплексная зонная структура, рассчитанная в модели сильной связи sp^3 для параметров ZnSe, приведенных в [16]. На рис. 1б изображена комплексная зонная структура для модельного полупроводника, sp^3 -параметры которого подобраны таким образом,

чтобы ширина запрещенной зоны в Γ -точке равнялась 4.4 эВ и зоны проводимости Γ_1^c , Γ_{15}^c были близко расположены в соответствии с расчетом [19, 20]. Сплошными линиями на рис. 1 показаны ветви s - p_z , удовлетворяющие дисперсионному уравнению (5), штриховыми — решения (8).

В гетероструктурах, выращенных в направлении [001], уравнения для коэффициентов $C_n^{\alpha b}$ сохраняют вид (3а), (7), однако параметры $E_{\alpha b}$ и $V_{\alpha b, \alpha' b'}$ в слоях СА и С'А' различаются и значения этих параметров для интерфейсных атомных плоскостей могут отличаться от аналогичных объемных значений.

3. КОЭФФИЦИЕНТ ОТРАЖЕНИЯ ЭЛЕКТРОНА НА ОДИНОЧНОМ ИНТЕРФЕЙСЕ

Рассчитаем коэффициент отражения электрона, находящегося в $p_{x'}$ -орбитальном состоянии и налетающего справа налево на интерфейс $\dots -C'(-3) - A'(-2) - C'(-1) - A(0) - C(1) - A(2) - C(3) - \dots$. В скобках указаны номера соответствующих атомных плоскостей, анионной интерфейсной плоскости А приписан номер $n = 0$, ось x' лежит в плоскости интерфейсных химических связей С'–А, ось $y' \perp x', z$. Предполагается, что потолок валентной зоны в слое СА выше, чем в слое С'А'. При $n \geq 0$ решение представляет собой сумму падающей и отраженной волн:

$$\begin{aligned} C_{2l}^{p_{x'}a} &= C_{p_{x'}a}(-k) \exp\left(-ik \frac{a_0}{2} l\right) + \\ &+ \rho_{x'} C_{p_{x'}a}(k) \exp\left(ik \frac{a_0}{2} l\right), \\ C_{2l+1}^{p_{x'}c} &= C_{p_{x'}c}(-k) \exp\left[-ik \frac{a_0}{4} (2l+1)\right] + \\ &+ \rho_{x'} C_{p_{x'}c}(k) \exp\left[ik \frac{a_0}{4} (2l+1)\right]. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь $\pm k$ — вещественные волновые векторы электрона с энергией E ($k > 0$), а коэффициенты $C_{p_{x'}c}(k), C_{p_{x'}a}(k)$ связаны с параметрами сильной связи соотношениями

$$C_{p_{x'}a}(k) = \sqrt{\frac{R+D}{2R}}, \quad \frac{C_{p_{x'}c}(k)}{C_{p_{x'}a}(k)} = -\frac{V(k)}{R+D}. \quad (10)$$

Решение при $n < 0$ характеризуется мнимым волновым вектором $-i\kappa$ ($\kappa > 0$) и затухает при $n \rightarrow -\infty$. Коэффициент отражения ρ , по модулю равный единице, можно найти из уравнений

$$\begin{aligned} \tilde{U}_+ C_{-1}^{p_{x'}c} + (\tilde{E}_{pa} - E) C_0^{p_{x'}a} + U_- C_1^{p_{x'}c} &= 0, \\ U'_- C_{-2}^{p_{x'}a} + (\tilde{E}_{pc} - E) C_{-1}^{p_{x'}c} + \tilde{U}_+ C_0^{p_{x'}a} &= 0, \end{aligned}$$

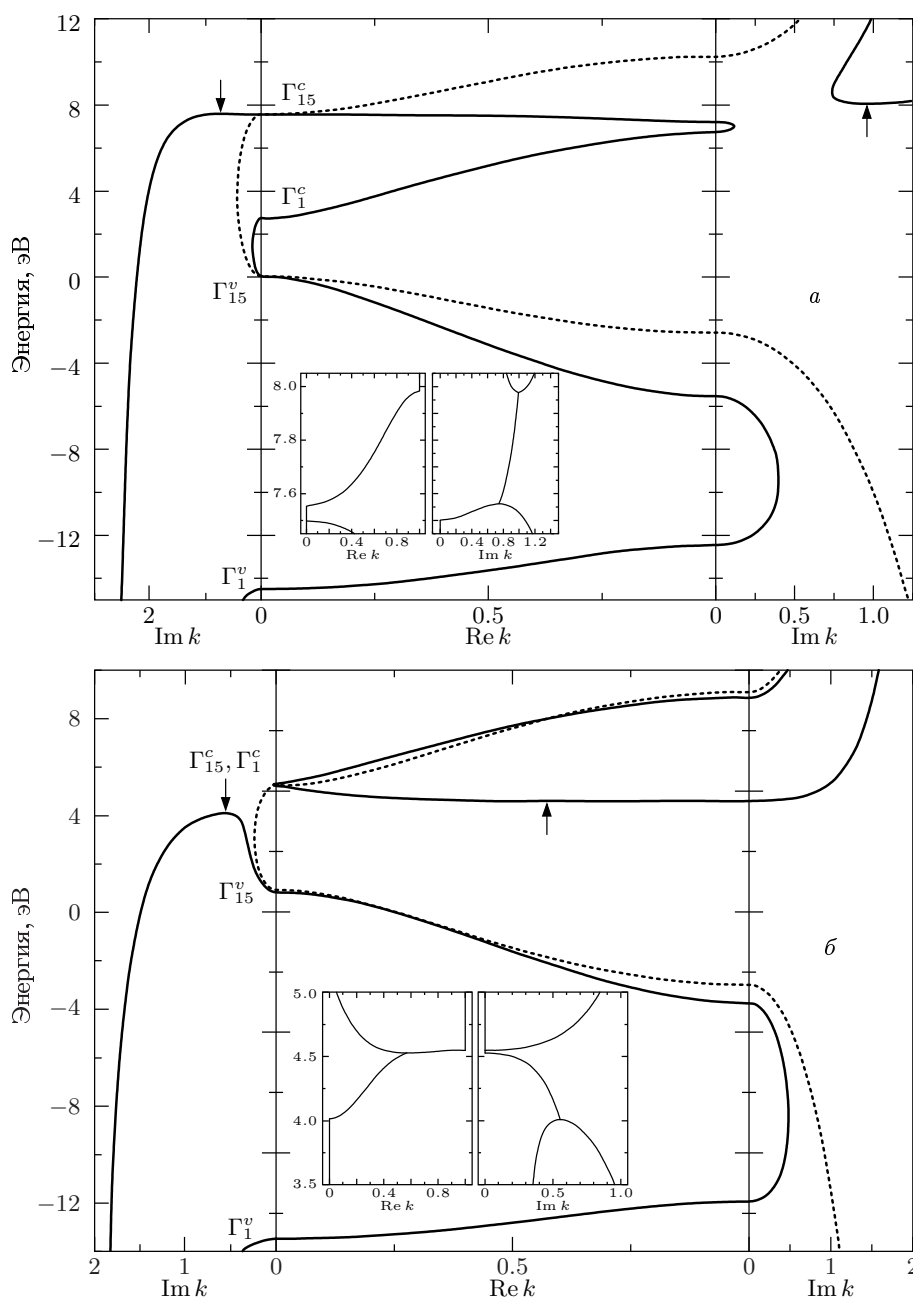


Рис. 1. Дисперсия электрона, рассчитанная для ZnSe (а) и BeTe (б) в sp^3 -модели сильной связи. На левой, средней и правой панелях изображена зависимость энергии от волнового вектора k для решений соответственно с чисто мнимыми, реальными и комплексными (при $\text{Re } k = 2\pi/a_0$) значениями k . На вставке показана связь энергии с реальной и мнимой частями волнового вектора для решений четвертой категории. По горизонтальной оси отложены величины в единицах $2\pi/a_0$. При расчете использованы следующие значения параметров сильной связи: диагональные энергии $E_{sa} = -11.8$ (а), -11.2 (б) эВ, $E_{sc} = 0.02$ (а), 2.8 (б) эВ, $E_{pa} = 1.5$ (а), 2.23 (б) эВ, $E_{pc} = 6.0$ (а), 3.77 (б) эВ; недиагональные параметры сильной связи $V_{ss} = -6.2$ эВ, $V_{xx} = 3$ (а), 2 (б) эВ, $V_{sa,pc} = 3.5$ эВ, $V_{pa,sc} = 6.3$ эВ, $V_{xy} = 5.0$ эВ

где знак «тильда» означает параметры сильной связи для интерфейсных атомов, а штрих — для атомов в слое $C'A'$. Опуская промежуточные выкладки, приведем окончательный результат

$$\rho_{x'} = -\exp(i2\phi_{x'}), \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \phi_{x'} &= \\ &= \frac{U_+ U_- \sin(ka_0/2)}{(\tilde{E}_{pa} - E - \Sigma_{x'})(R+D) - U_-^2 - U_+ U_- \cos(ka_0/2)}, \end{aligned}$$

$$\Sigma_{x'} = \frac{\tilde{U}_+^2}{\tilde{E}_{pc} - E + \zeta_{x'} U_-'},$$

$$\begin{aligned} \zeta_{x'} &= \exp\left(-\frac{\kappa a_0}{4}\right) \frac{C_{p_{x'},a}(-i\kappa)}{C_{p_{x'},c}(-i\kappa)} = \\ &= -\exp\left(-\frac{\kappa a_0}{4}\right) \frac{R' + D'}{V'(-i\kappa)}. \end{aligned}$$

Выражения для $\phi_{y'}$, $\Sigma_{y'}$ и $\zeta_{y'}$ получаются заменой U_+, U_- на U_-, U_+ .

Подставляя (11) в (9) и учитывая равенство коэффициентов $C_{p_{x'},a}(k) = C_{p_{x'},a}(-k)$, находим вместо (9)

$$C_{2l}^{p_{x'},a} = -2iC_{pa}(k) \exp(i\phi_{x'}) \sin\left(k\frac{a_0}{2}l + \phi_{x'}\right), \quad (12)$$

$$\begin{aligned} C_{2l+1}^{p_{x'},c} &= 2iC_{pa}(k) \exp(i\phi_{x'}) \times \\ &\times \left\{ \frac{U_+}{R+D} \sin\left[k\frac{a_0}{2}(l+1) + \phi_{x'}\right] + \right. \\ &\left. + \frac{U_-}{R+D} \sin\left(k\frac{a_0}{2}l + \phi_{x'}\right) \right\}. \end{aligned}$$

Индекс x' у коэффициента $C_{p_{x'},a}$ опущен, так как $C_{p_{x'},a} = C_{p_{y'},a}$.

4. СВЯЗЬ МЕЖДУ КОЭФФИЦИЕНТАМИ ОТРАЖЕНИЯ И ЭНЕРГИЕЙ РАЗМЕРНОГО КВАНТОВАНИЯ НОСИТЕЛЯ ЗАРЯДА

Знание коэффициента отражения от интерфейса в зависимости от энергии E позволяет записать уравнение для энергии размерного квантования электрона (дырки). Рассмотрим структуру со слоем CA толщиной a между толстыми слоями $C'A'$

и с интерфейсами, содержащими химические связи $C'-A$. Такая структура имеет точечную симметрию D_{2d} , оси x' и y' совпадают с прямыми пересечения плоскости интерфейса с плоскостями, содержащими интерфейсные химические связи соответственно на левом и правом интерфейсах. Размерно-квантованные $p_{x'}$ - и $p_{y'}$ -орбитальные состояния дырки вырождены, и уравнение для E можно записать в форме

$$\rho_{x'}(E)\rho_{y'}(E) = \exp(-2ik(E)a). \quad (13)$$

Заметим, что здесь a — расстояние между анионными интерфейсными плоскостями. Для получения оценок можно положить $\rho_{x'}(E) = \rho_{y'}(E) = -1$, как для бесконечно высоких барьеров в методе эффективной массы. Тогда, например, для основного состояния уравнение (13) преобразуется к уравнению

$$k(E) = \frac{\pi}{a}. \quad (14)$$

Аналогично можно рассчитать коэффициент отражения и записать уравнение для энергии размерного квантования электрона в зоне проводимости структуры, состоящей из слоя $C'A'$ толщиной a' между толстыми слоями CA . Состояния в однородном материале можно найти с помощью решения четырех линейных уравнений, получаемых из (3а)–(3г). Однако выражение для соответствующего коэффициента отражения $\rho_{c.b.}$ получается слишком громоздким, поэтому его значения находились путем численного решения указанной системы уравнений. При этом учитывалось, что в sp^3 -модели значению E , расположенному непосредственно над дном зоны проводимости полупроводника, соответствует четыре волновых вектора $\pm k$, $\pm i\kappa$ (k, κ вещественны), а значению E , лежащему в запрещенной зоне, — мнимые значения волнового вектора $\pm i\kappa_1, \pm i\kappa_2$. Под величиной $\rho_{c.b.}$ понимается отношение амплитуды отраженной волны $-k$ к амплитуде падающей волны k . Если толщина слоя a' достаточно велика, так что $\exp(-\kappa a'/2) \ll 1$, то энергии размерного квантования можно рассчитывать по формуле (13), в которой нужно заменить a на a' и $\rho_{x'}\rho_{y'}$ на $\rho_{c.b.}^2$.

5. МЕЖЗОННЫЙ МАТРИЧНЫЙ ЭЛЕМЕНТ ОПТИЧЕСКОГО ПЕРЕХОДА НА ИНТЕРФЕЙСЕ ТИПА II

Матричный элемент оптического перехода для фотона поляризации e пропорционален матричному

элементу оператора скорости \hat{v} , умноженному скалярно на \mathbf{e} . Чтобы выразить матричные элементы оператора \hat{v} в терминах коэффициентов C_n^{ab} разложения $\psi(\mathbf{r})$ по планарным орбиталам, нужно найти сначала представление \hat{v} в базисе атомных орбиталей $\Phi_\alpha^b(\mathbf{r} - \mathbf{a} - \boldsymbol{\tau}_b)$, где α — индекс орбитали, а векторы \mathbf{a} и $\boldsymbol{\tau}_b$ задают положение элементарной ячейки и положение атома сорта b внутри ячейки. Атомные орбитали полностью задаются двумя параметрами: α и положением атома $\mathbf{R} = \mathbf{a} + \boldsymbol{\tau}_b$. Иногда для удобства мы будем вводить избыточный индекс b , указывающий сорт атома. Гамильтониан сильной связи задается матричными элементами $H_{\alpha'\alpha}^{b'b}(\mathbf{R}', \mathbf{R})$.

В методе сильной связи выражение для матричных элементов оператора скорости можно найти, если воспользоваться формулой

$$\hat{v} = \frac{i}{\hbar}(H\mathbf{r} - \mathbf{r}H),$$

связывающей операторы скорости и координаты, взять гамильтониан H в представлении $H_{\alpha'\alpha}^{b'b}(\mathbf{R}', \mathbf{R})$ и ввести матричные элементы оператора координаты $\mathbf{r}_{\alpha'\alpha}(\mathbf{R}, \mathbf{R}')$. Обычно ограничиваются учетом только внутриузельных матричных элементов (см. [21, 22] и цитируемую там литературу)

$$\mathbf{r}_{\alpha'\alpha}(\mathbf{R}', \mathbf{R}) \equiv \langle \mathbf{R}', \alpha' | \mathbf{r} | \mathbf{R}, \alpha \rangle = (\mathbf{R}\delta_{\alpha'\alpha} + \mathbf{r}_{\alpha'\alpha})\delta_{\mathbf{R}', \mathbf{R}}, \quad (15)$$

где вклад

$$\mathbf{r}_{\alpha'\alpha} = \langle \mathbf{R}, \alpha' | \mathbf{r} - \mathbf{R} | \mathbf{R}, \alpha \rangle$$

описывает межорбитальные переходы на одном атомном узле. Мы используем теорию, развитую в [23] (см. также [24–26]), в которой полагается $\mathbf{r}_{\alpha'\alpha} = 0$ и оптические переходы однозначно задаются параметрами сильной связи. Тогда для оператора скорости получаем

$$\mathbf{v}_{\alpha'\alpha}^{b'b}(\mathbf{R}', \mathbf{R}) = \frac{i}{\hbar}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')H_{\alpha'\alpha}^{b'b}(\mathbf{R}', \mathbf{R}).$$

Видно, что согласно этой теории внутриатомные слагаемые $\mathbf{v}_{\alpha'\alpha}^{bb}(\mathbf{R}, \mathbf{R})$ равны нулю, а межатомные слагаемые направлены вдоль вектора $\mathbf{R} - \mathbf{R}'$, т. е. по направлению химической связи между атомами \mathbf{R} и \mathbf{R}' . В этом случае межатомные переходы между плоскостями $2l$, $2l - 1$ и $2l$, $2l + 1$ приводят к излучению фотонов, поляризованных соответственно по осям $x' \parallel [1\bar{1}0]$ и $y' \parallel [110]$.

Оптические матричные элементы, соответствующие излучаемым фотонам, поляризованным вдоль осей x' и y' , даются выражениями

$$M_j = i\frac{a_0}{4\hbar} \sum_l V_l^j, \quad (16)$$

где

$$V_l^{x'} = V_{sa,pc}C_{2l}^{sa*}C_{2l-1}^{p_{x'}c} + V_{pa,sc}C_{2l-1}^{sc*}C_{2l}^{p_{x'}a} - V_{xy}(C_{2l}^{p_z a*}C_{2l-1}^{p_{x'}c} - C_{2l-1}^{p_z c*}C_{2l}^{p_{x'}a}),$$

$$V_l^{y'} = V_{sa,pc}C_{2l}^{sa*}C_{2l+1}^{p_{y'}c} + V_{pa,sc}C_{2l+1}^{sc*}C_{2l}^{p_{y'}a} + V_{xy}(C_{2l}^{p_z a*}C_{2l+1}^{p_{y'}c} - C_{2l+1}^{p_z c*}C_{2l}^{p_{y'}a}).$$

Здесь M_j — межзонный матричный элемент оператора скорости \hat{v}_j , $j = x', y'$, $V_l^{x'}$ — вклад в $M_{x'}$ от межатомных переходов между анионной плоскостью $2l$ и катионной плоскостью $2l - 1$, $V_l^{y'}$ — аналогичный вклад в $M_{y'}$ от переходов между плоскостями $2l$ и $2l + 1$, C_n^{sb} , $C_n^{p_z b}$ — коэффициенты при s - и p_z -орбитали в разложении (1) для состояний электрона в нижней зоне проводимости Γ_1 , $C_n^{p_j b}$ — p_j -орбитальный коэффициент для p_j -состояний дырки в валентной зоне, $V_{sa,pc}$, $V_{pa,sc}$ и V_{xy} — недиагональные (анион-катионные) параметры сильной s - p - и p_x - p_y -связи, см. (3а) и (8). Например, $V_{sa,pc}$, $V_{pa,sc}$ определены так, что для атомных узлов \mathbf{R}' и \mathbf{R} , лежащих в плоскостях $n' = 2l$ и $n = 2l - 1$, имеем

$$H_{sp_z}^{ca}(\mathbf{R}', \mathbf{R}) = \frac{V_{pa,sc}}{4}, \quad H_{p_z s}^{ca}(\mathbf{R}', \mathbf{R}) = -\frac{V_{sa,pc}}{4},$$

а для \mathbf{R}' и \mathbf{R} , лежащих в плоскостях $n' = 2l + 1$ и $n = 2l$, имеем

$$H_{sp_z}^{ca}(\mathbf{R}', \mathbf{R}) = -\frac{V_{pa,sc}}{4}, \quad H_{p_z s}^{ca}(\mathbf{R}', \mathbf{R}) = \frac{V_{sa,pc}}{4}.$$

Множитель $1/4$ получается, если учесть, что, например,

$$H_{sp_j}^{ca} = \pm\sqrt{2}\frac{V_{pa,sc}}{4}, \quad H_{p_j s}^{ca} = \pm\sqrt{2}\frac{V_{sa,pc}}{4}$$

и что по каждую сторону от атома, лежащего в атомной плоскости (001), имеется по два ближайших соседа другого сорта. Заметим, что в [11] слагаемые из (16), пропорциональные V_{xy} , опущены. В дальнейшем рассматривается излучательная рекомбинация электронов и дырок с нижних подзон размерного квантования $e1$ и $h1$.

6. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА И ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты расчета степени линейной поляризации люминесценции

$$P_{lin} = \frac{I_{1\bar{1}0} - I_{110}}{I_{1\bar{1}0} + I_{110}}$$

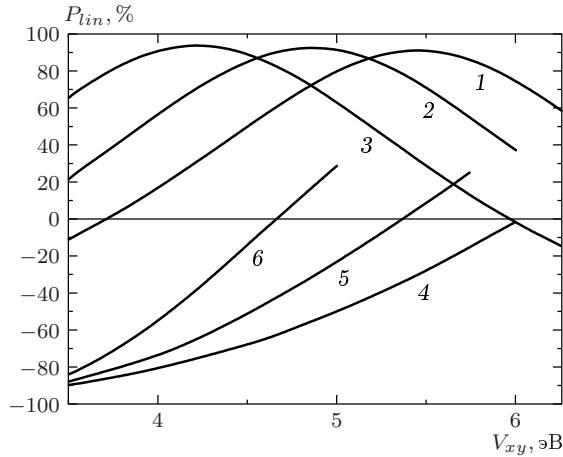


Рис. 2. Линейная поляризация фотolumинесценции в гетероструктуре ZnSe/BeTe в зависимости от параметра сильной связи V_{xy} на интерфейсе для гетероперехода с интерфейсной связью ZnTe (кривые 1, 2, 3) или BeSe (кривые 4, 5, 6). Параметры сильной связи для обоих материалов указаны в подписи к рис. 1. Кривые 1, 2, 3 рассчитаны соответственно при значении диагональной энергии $E_{pc} = 5, 6, 7$ эВ для интерфейсного Zn, кривые 4, 5, 6 — при $E_{pc} = 3, 4, 5$ эВ для интерфейсного Be. Для остальных интерфейсных параметров выбраны средние значения, например, $E_{sa}(\text{ZnTe}) = [E_{sa}(\text{ZnSe}) + E_{sa}(\text{BeTe})]/2$ и т. п.

показаны на рис. 2. Здесь $I_{1\bar{1}0}$ и I_{110} — интенсивности компонент, поляризованных вдоль соответствующих осей. Заметим, что постоянные решетки ZnSe и BeTe близки друг к другу, т. е. ZnSe/BeTe — гетеропара с согласованными решетками, но они заметно отличаются от постоянных решетки объемного полупроводника ZnTe или BeSe. Поэтому в данной работе коэффициенты сильной связи для интерфейсных атомов считаются независимыми параметрами теории. Три зависимости P_{lin} от интерфейсного коэффициента V_{xy} , изображенные на верхней панели рис. 2, рассчитаны для интерфейса ZnTe при трех различных значениях диагональных энергий $E_{pc} = 5, 6, 7$ эВ для атомов Zn на интерфейсе. Остальные параметры для интерфейсных атомов выбирались путем усреднения аналогичных параметров в объемных материалах, составляющих гетеропару. На нижней панели кривые $P_{lin}(V_{xy})$ рассчитаны для интерфейса BeSe при $E_{pc} = 3, 4, 5$ эВ для атома Be на интерфейсе и усреднении других интерфейсных параметров сильной связи. Из рис. 2 следует основной качественный вывод данной работы: в гетероструктурах типа II фотolumинесценция

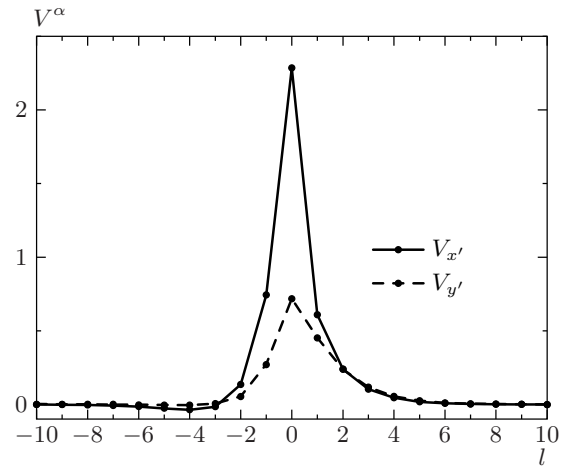


Рис. 3. Вклад V_l^α различных пар атомных плоскостей $2l, 2l - 1$ (точки, соединенные сплошными линиями) и $2l, 2l + 1$ (точки, соединенные штриховыми линиями) в межатомный матричный элемент оптического перехода M_α при недиагональном матричном элементе сильной связи $V_{xy} = 5$ эВ для интерфейсных атомов Zn и Te. Остальные параметры те же, что были использованы при расчете кривой 1 на рис. 2

может быть сильно поляризована, теория допускает высокие значения P_{lin} для совершенных интерфейсов без включения в рассмотрение анизотропных локализованных состояний, обусловленных неидеальностью гетероперехода. Из рис. 2 вытекает и второй важный вывод: как правило, плоскость поляризации люминесценции совпадает с плоскостью интерфейсных химических связей, что было предсказано в [11] на основе качественного анализа. Коэффициенты $C_n^{\alpha\beta}$ разложения (1), входящие в выражения (16) для матричных элементов и использованные при расчете кривых на рис. 2, рассчитывались для периодических гетероструктур с толщинами 75 Å и 50 Å слоев ZnSe и BeTe. В этом случае энергии размерного квантования в состояниях $e1$ и $h1$ составляют соответственно 39 и 23 мэВ. Абсолютные значения оптических матричных элементов весьма чувствительны к толщинам слоев, тогда как поляризация P_{lin} мало зависит от энергии квантования электрона и дырки в широком диапазоне толщин. Однако напомним, что здесь мы рассматриваем электронное и дырочное состояния только при $k_x = k_y = 0$.

Точки на рис. 3 показывают вклады V_l^j , вносимые в оптический матричный элемент M_j межатомными переходами $2l \leftrightarrow 2l - 1$ (при $j = x'$) и $2l \leftrightarrow 2l + 1$

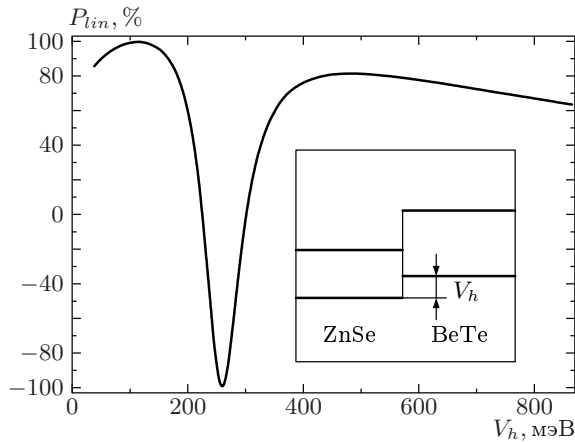


Рис. 4. Зависимость линейной поляризации люминесценции от разрыва валентной зоны на гетеропереходе. Расчет выполнен для интерфейса ZnTe при $V_{xy}(\text{ZnTe}) = 5$ эВ, остальные параметры те же, что были использованы при расчете кривой 1 на рис. 2

(при $j = y'$). Как и предсказывалось в [11], максимальный вклад в $M_{x'}$ вносит пара интерфейсных атомных плоскостей Zn и Te, а определяющую роль в сумме (16) играют только слагаемые с $l = 0, \pm 1$.

Зависимость степени поляризации P_{lin} от разрыва валентных зон V_h на интерфейсе, рассчитанная для интерфейса ZnTe при $V_{xy}(\text{ZnTe}) = 5$ эВ и $E_{n=-1}^{pc} = 5$ эВ, показана на рис. 4. Смена знака поляризации и достижение ею значения -100% объясняются тем, что с уменьшением разрыва зон зависимость $V_l^{x'}$ от l становится знакопеременной и при некотором значении $V_h \approx 260$ мэВ сумма по l слагаемых $V_l^{x'}$ в (16) обращается в нуль.

Расчет, результаты которого представлены на рис. 2–4, проводился в пренебрежении внутриатомными (внутриузельными) переходами. В настоящее время не сформировалось однозначного мнения об относительных вкладах внутри- и межатомных переходов в межзонные оптические матричные элементы. В ряде работ [27–29] учитывались как те, так и другие переходы, но использованные значения внутриатомных матричных элементов оператора импульса превышали аналогичные значения для анион-катионных переходов. В работах [30–32] вклад межатомных переходов вообще не учитывался. В то же время многие авторы [23–26] полностью пренебрегали внутриатомными переходами. Для сравнения представляло интерес рассчитать зависимость $P_{lin}(V_{xy})$ при учете только внутриатомных перехо-

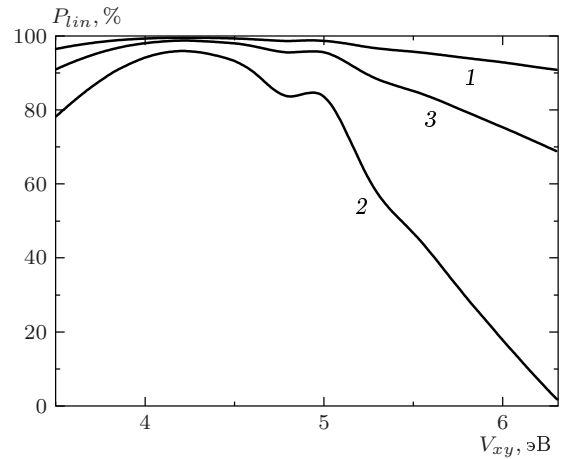


Рис. 5. Зависимость линейной поляризации люминесценции от интерфейсного параметра сильной связи V_{xy} при учете только внутриатомных переходов: 1 — $r_{sp}^c \neq 0, r_{sp}^a = 0$, 2 — $r_{sp}^c = 0, r_{sp}^a \neq 0$, 3 — $r_{sp}^c = r_{sp}^a \neq 0$. Расчет выполнен для интерфейса ZnTe при $V_{xy}(\text{ZnTe}) = 5$ эВ, остальные параметры те же, что были использованы при расчете кривой 1 на рис. 2

дов. Поэтому мы положили

$$\mathbf{r}_{\alpha'\alpha}(\mathbf{R}', \mathbf{R}) = \mathbf{r}_{\alpha'\alpha}^b \delta_{\mathbf{R}'\mathbf{R}}$$

и учли, что матричные элементы $\mathbf{r}_{\alpha'\alpha}^b$ отличны от нуля для пары орбиталей $\alpha' = s, \alpha = p_j$ или $\alpha' = p_j, \alpha = s$, так что

$$\mathbf{r}_{sp_j}^b = \mathbf{r}_{p_j s}^b = r_{sp}^b \mathbf{o}_j,$$

где $r_{sp}^b = z_{sp_z}^b$, \mathbf{o}_j — орт в направлении оси j . Кривые на рис. 5 рассчитаны для трех частных случаев, когда один из параметров r_{sp}^c или r_{sp}^a равен нулю или когда они совпадают. Зависимость r_{sp}^c (r_{sp}^a) от сорта катиона (аниона) пренебрегалось. Из рис. 5 видно, что и при внутриатомных переходах линейная поляризация фотолюминесценции может быть очень высокой.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение сформулируем основные результаты работы. Развита теория сильной связи, позволяющая рассчитывать анизотропию непрямых оптических переходов в гетероструктурах AC/A'C' типа II, выращенных из композиционных материалов AC и A'C' с решеткой цинковой обманки в направлении кристаллографической оси [001]. Проанализировано, как влияют на линейную

поляризацию фотолюминесценции вид интерфейса ($C'A$ или $A'C$) и интерфейсные параметры сильной связи, такие как недиагональный коэффициент V_{xy} , диагональная энергия E_{pc} и разрыв зон на гетеропереходе V_h . В согласии с экспериментом [10–13] теория допускает гигантскую линейную поляризацию фотолюминесценции, обусловленной излучательной рекомбинацией электронно-дырочных пар на совершенном интерфейсе II рода. Расчет показывает, что поляризация, как правило, отслеживает ориентацию интерфейсных химических связей и меняет знак при замене интерфейса $C'A$ ($ZnTe$) на CA' ($BeSe$). Степень поляризации почти нечувствительна к толщинам d_{AC} , $d_{A'C'}$ слоев AC и $A'C'$ в широком диапазоне толщин, тогда как сила осциллятора для межзонных переходов зависит от d_{AC} , $d_{A'C'}$ очень сильно. Основной вклад в межзонный оптический матричный элемент определяется переходами между несколькими атомными плоскостями катионов и анионов, примыкающими к интерфейсу, причем максимальный вклад вносят переходы между интерфейсными плоскостями. Отметим, что sp^3 -модель является простейшей моделью сильной связи, которая позволяет описывать микроскопические волновые функции электрона как в зоне проводимости, так и в валентной зоне, что необходимо для расчета межзонных матричных элементов оптических переходов. Однако сформулированные выше выводы качественно сохраняют свою силу и для более сложных моделей сильной связи, таких как sp^3s^* [16] или sp^3s^*d [17]. Кроме того, в развитой теории не учитывалось спин-орбитальное расщепление валентной зоны композиционных материалов. Анализ показывает, что для оптических переходов «зона проводимости — подзона тяжелых дырок» учет спин-орбитального взаимодействия может привести лишь к некоторым количественным изменениям.

Работа выполнена при поддержке INTAS (грант 99-00015) и РФФИ (проект 00-02-16997).

ЛИТЕРАТУРА

1. O. Krebs and P. Voisin, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1829 (1996).
2. O. Krebs, W. Seidel, J. P. André et al., *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 938 (1997).
3. O. Krebs, D. Rondi, J. L. Gentner et al., *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5770 (1998).
4. Е. Л. Ивченко, А. А. Торопов, П. Вуазен, *ФТТ* **40**, 1925 (1998).
5. A. A. Toropov, E. L. Ivchenko, O. Krebs et al., *Phys. Rev. B* **63**, 035302 (2001).
6. Е. Л. Ивченко, А. Ю. Каминский, И. Л. Алейнер, *ЖЭТФ* **104**, 3401 (1993).
7. D. Vignaud, X. Wallart, F. Molloy, and B. Sermage, *J. Appl. Phys.* **84**, 2138 (1998).
8. F. Fuchs, J. Schmitz, J. D. Ralston et al., *Superlatt. Microstruct.* **16**, 35 (1994).
9. F. Fuchs, J. Schmitz, and N. Herres, *Proc. 23 Int. Conf. Phys. Semicond.*, ed. by M. Scheffler and R. Zimmermann, World Scientific, Berlin (1996), Vol. 3, p. 1803.
10. A. V. Platonov, V. P. Kochereshko, E. L. Ivchenko et al., *Acta Phys. Polon. A* **94**, 479 (1998).
11. A. V. Platonov, V. P. Kochereshko, E. L. Ivchenko et al., *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3546 (1999).
12. D. R. Yakovlev, E. L. Ivchenko, V. P. Kochereshko et al., *Phys. Rev. B* **61**, 2421 (2000).
13. M. Schmidt, M. Grün, S. Petillon et al., *Appl. Phys. Lett.* **77**, 85 (2000).
14. O. Krebs and P. Voisin, *Phys. Rev. B* **61**, 7265 (2000).
15. P. O. Löwdin, *J. Chem. Phys.* **18**, 365 (1950).
16. P. Vogl, H. P. Hjalmarson, and J. D. Dow, *J. Phys. Chem. Sol.* **44**, 365 (1983).
17. J. M. Jancu, R. Scholz, F. Beltram, and F. Bassani, *Phys. Rev. B* **57**, 6493 (1998).
18. Y.-C. Chang, *Phys. Rev. B* **25**, 605 (1982).
19. D. J. Stukel, *Phys. Rev. B* **2**, 1852 (1970).
20. M. Nagelstrasser, H. Dröge, H.-P. Steinrück et al., *Phys. Rev. B* **58**, 10394 (1998).
21. M. Cruz, M. R. Beltran, C. Wang et al., *Phys. Rev. B* **59**, 15381 (1999).
22. T. G. Pedersen, K. Pedersen, and T. B. Kriestensen, *Phys. Rev. B* **63**, 201101 (2001).
23. L. C. Lew Yan Voon and L. R. Ram-Mohan, *Phys. Rev. B* **47**, 15500 (1993).
24. M. Graf and P. Vogl, *Phys. Rev. B* **51**, 4940 (1995).
25. P. V. Santos, P. Etchegoin, M. Cardona et al., *Phys. Rev. B* **50**, 8746 (1994).

26. T. Dumitrică, J. S. Graves, R. E. Allen, Phys. Rev. B **58**, 15340 (1998).
27. Y.-C. Chang and J. N. Schulman, Phys. Rev. B **31**, 2069 (1985).
28. Y.-C. Chang and D. E. Aspnes, Phys. Rev. B **41**, 12002 (1990).
29. G. D. Sanders and Y.-C. Chang, Phys. Rev. B **45**, 9202 (1992).
30. Z. Xu, Sol. St. Comm. **76**, 1143 (1990)
31. L. M. Ramaniah and S. V. Nair, Phys. Rev. B **47**, 7132 (1993).
32. A. Selloni, P. Marsella, and R. Del Sole, Phys. Rev. B **33**, 8885 (1986).