

© 1992

## РАЗМЕРНО-ИНДУЦИРОВАННЫЕ СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ В КВАЗИДВУМЕРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СИСТЕМАХ

*Э. П. Синявский, Е. Ю. Канаровский*

В модели потенциала нулевого радиуса вычисляются связанные состояния в размерно-квантованных пленках (РКП). Показано, что в рассматриваемых системах возникают связанные состояния, отсутствовавшие в объемном материале. Исследуются процессы поглощения (спонтанного излучения) электромагнитной волны с учетом этих состояний и обсуждаются условия экспериментального их обнаружения.

Исследование особенностей примесного поглощения света РКП проводилось в [1]. При этом энергия связанного состояния  $\epsilon$ , отсчитанная от дна зоны проводимости объемного материала, оставалась отрицательной. В этих же условиях исследовались особенности поведения связанных состояний в квантуемом магнитном поле в [2]. Однако с уменьшением толщины пленки энергии  $\epsilon$  может оказаться положительной (если же отчет энергии вести от дна нижней зоны проводимости РКП, энергия связанного состояния отрицательна, т. е. расположена в области запрещенной зоны).

В случае мелких примесных центров, в которых отсутствуют связанные состояния, в магнитном поле движение носителя поперек поля затруднено и реализуется фактически одномерный случай. Это обстоятельство приводит к появлению связанных состояний [3]. Близкая ситуация реализуется в случае РКП: с уменьшением толщины в квазидвумерной системе тоже возникают связанные состояния, которые отсутствовали в объемном материале. Эти размерно-индуцированные связанные состояния, естественно, приводят к новым каналам рекомбинации неравновесных носителей тока, поглощению (спонтанному излучению) света, что безусловно расширяет возможности практического применения размерно-квантованных полупроводниковых систем.

В настоящей работе методом потенциала нулевого радиуса [4] исследуются условия возникновения размерно-индуцированных связанных состояний (РИСС) и обсуждаются оптические свойства РКП с учетом этих состояний.

Волновая функция и энергия электрона в общепринятой модели РКП (потенциал  $V(z)$  вдоль оси  $OZ$  представляет собой прямоугольную яму с бесконечно высокими стенками шириной  $a$ ) имеют вид

$$\Psi_{n,k_{\perp}}(r) = \left[ \frac{2}{L_x L_y a} \right]^{1/2} \exp \{ i(k_x x + k_y y) \} \sin \frac{\pi n z}{a},$$

$$E_{n,k_{\perp}} = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_c} + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m_c a^2}, \quad (1)$$

$L_x, L_y$  — длина образца в направлениях  $OX, OY$ ;  $k_{\perp}^2 = k_x^2 + k_y^2$ ;  $m_c$  — эффективная масса электрона в зоне проводимости;  $k_{\perp}$  — квазиимпульс носителя в плоскости  $ХОУ$ .

Энергия связанного состояния для  $\delta$ -образного потенциала примеси определяется из соотношения [4].

$$V_0 \tilde{G}(0, 0) = 1, \quad (2)$$

$$\tilde{G}(0, 0) = \left[ 1 + x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + (z - z_0) \frac{\partial}{\partial z} \right] \times G(r, r_0) \Big|_{x=y=0; z=z_0},$$

$V_0$  — мощность потенциальной ямы, связанная с феноменологическим параметром  $E(0)$  — глубиной залегания уровня;  $G(r, r_0)$  — функция Грина, определяемая соотношением

$$G(r, r_0) = \sum_{n,k_{\perp}} \frac{\psi_{nk_{\perp}}^*(r) \psi_{nk_{\perp}}(r_0)}{E - E_{n,k_{\perp}}}, \quad (3)$$

$E$  — искомая энергия связанного состояния, отсчитываемая от дна зоны проводимости объемного полупроводника.

При записи (2) предполагалось, что примесь расположена в точке с координатами  $r_0(0, 0, z_0)$ . Если учесть, что [4]

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin \frac{\pi n z}{a} \sin \frac{\pi n z_0}{a}}{n^2 + b^2} = \frac{\pi}{2b} \frac{1}{\operatorname{sh}(\pi b)} \operatorname{sh} \frac{\pi b}{2} (2 - z_1) \operatorname{sh} \frac{\pi b}{2} z_2,$$

$$z_1 = \frac{1}{a} [z + z_0 + |z - z_0|],$$

$$z_2 = \frac{1}{a} [z + z_0 - |z - z_0|]$$

и провести интегрирование в (3) по  $k_{\perp}$  с учетом (1), то функция Грина принимает вид

$$G(r, r_0) = -\frac{m_c}{\pi \hbar^2 a} \int_0^{\infty} \tau \mathcal{J}_0 \left( \frac{\rho \tau}{a} \right) \frac{1}{u \operatorname{sh} u} \operatorname{sh} \frac{u}{2} (2 - z_1) \operatorname{sh} \frac{u}{2} z_2 dt, \quad (4)$$

$$u^2 = \tau^2 - \frac{2m_c E}{\hbar^2} a^2, \quad \rho = \sqrt{x^2 + y^2}.$$

Подстановка (4) в (2) (особенности, возникающие в  $G(r, r_0)$  при  $x=y=0, z=z_0$ , снимаются обычной процедурой [5]) приводит к уравнению для энергии связанного состояния

$$\pi \sqrt{-\frac{E}{E_0}} \frac{a_0}{a} + \frac{a_0}{a} \int_{\pi \sqrt{-E/E_0}}^{\infty} \frac{\operatorname{ch} \tau \left( 1 - \frac{2z_0}{a} \right) - e^{-\tau}}{\operatorname{sh} \tau} d\tau = 1, \quad (5)$$

$$a_0 = \frac{m_c V_0}{2\pi \hbar^2}, \quad E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_c a^2}.$$

Для примесного состояния, когда  $E < 0$ , (5) в точности совпадает с уравнением для связанного состояния, полученным в [1]. Для массивного образца  $-E/E_0 \gg 1$  ( $-E > 0$ ) из (5) непосредственно следует, что

$$\begin{aligned} \varepsilon^{1/2} + \frac{a_0}{2z_0} e^{-\frac{2z_0}{a_0} \varepsilon^{1/2}} &= 1, \\ \varepsilon &= -\frac{E}{E_{\text{пр}}}, \quad E_{\text{пр}} = \frac{\hbar^2}{2m_c a_0^2}. \end{aligned} \quad (6)$$

При удалении локализованного состояния от границы образца ( $z_0/a_0 \gg 1$ ) из (6) получается известный результат для объемного образца  $E = -E_{\text{пр}}$ . Для частного случая, когда примесь расположена в центре квантованной пленки ( $Z_0 = a/2$ ), из (5) следует

$$\frac{2a_0}{a} \ln \left[ 2 \operatorname{ch} \frac{\pi}{2} \sqrt{-\frac{E}{E_0}} \right] = 1. \quad (7)$$

Решение (7) находится элементарно

$$\begin{aligned} E &= -\frac{4}{\pi^2} E_0 \left[ \operatorname{arth} \frac{\sqrt{\alpha^2 - 1}}{\alpha} \right]^2, \\ \alpha &= \frac{1}{2} e^{a/2a_0}. \end{aligned} \quad (8)$$

Энергия связанного состояния, отсчитанная от дна нижайшей зоны проводимости РКП, имеет вид

$$\frac{E_{\text{св}}}{E_{\text{пр}}} = -\left(\frac{a_0}{a}\right)^2 \left[ \pi^2 + 4 \left( \operatorname{arth} \frac{\sqrt{\alpha^2 - 1}}{\alpha} \right)^2 \right]. \quad (9)$$

При  $a/2a_0 \gg 1$

$$E_{\text{св}} \approx -E_{\text{пр}} \left[ 1 + \left( \frac{\pi a_0}{a} \right)^2 \right],$$

т. е. с уменьшением толщины образца  $E_{\text{св}}$  по абсолютной величине увеличивается. Если  $a/2a_0 < 1$ , т. е.  $\alpha^2 < 1$  (этот случай не рассматривался в [1,2]), то, согласно (9),

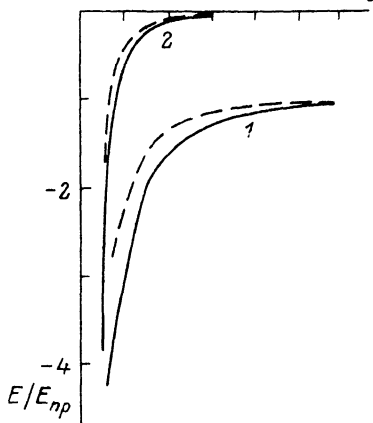
$$\frac{E_{\text{св}}}{E_{\text{пр}}} = -\left(\frac{\pi a_0}{a}\right)^2 \left[ 1 - \left( \frac{2}{\pi} \arccos \alpha \right)^2 \right]. \quad (10)$$

Зависимость  $E_{\text{св}}/E_{\text{пр}}$  от толщины РКП в широкой области изменения  $a/a_0$  приведена на рисунке (кривая 1). Согласно соотношению (10), если радиус связанного состояния значительно больше толщины пленки ( $2a_0 \gg a$ ), то  $E_{\text{св}} = (-5/9) E_0$ . При  $V_0 < 0$  из (9) следует, что

$$\begin{aligned} \frac{E_{\text{св}}}{E_{\text{пр}}} &= -\left(\frac{\pi a_0}{a}\right)^2 \left[ 1 - (\pi \arccos \alpha_1)^2 \right], \\ \alpha_1 &= \frac{1}{2} e^{-a/2a_0}. \end{aligned} \quad (11)$$

При  $a/2a_0 \gg 1$

2       $\delta$       10  $a/a_0$



Зависимость энергии связанного состояния (в относительных единицах) от толщины квантованной пленки.

Кривая 1 относится к случаю  $V_0 > 0$ , кривая 2 описывает РИСС.

$$\frac{E_{св}}{E_{пр}} \approx -2\pi \left(\frac{a_0}{a}\right)^2 e^{-a/a_0},$$

в объемном полупроводнике локализованные состояния отсутствуют и при уменьшении толщины пленки возникают РИСС (см. рисунок, кривая 2). Заметим, что если примесь расположена не в центре РКП ( $z_0 \neq a/2$ ), то численные расчеты уравнения (5) показывают, что зависимость  $E/E_{пр}$  от  $a/a_0$  мало отличается от случая  $z_0 = a/2$  (штриховой линией на рисунке приведена зависимость  $E/E_{пр}$  от  $a/a_0$  при

$z_0 = 0.8a$ ). В объемном полупроводнике короткодействующие примесные центры с  $V_0 < 0$  проявляют себя только как центры рассеяния, а в РКП они могут принимать активное участие в поглощении света, в процессах рекомбинации неосновных носителей тока.

Рассмотрим поглощение света, связанное с переходом электрона из валентной зоны на РИСС в РКП. Волновая функция связанного состояния простым образом связана с функцией Грина (4)

$$\Psi_{св}(r) = CG(r, r_0),$$

$$C = -\frac{\hbar^2}{m_c \sqrt{a}} \left[ \frac{\pi(ka) \operatorname{sh}(ka)}{\operatorname{sh}(kz_0) \operatorname{sh}\left[1 - \frac{z_0}{a}\right](ka)} \right]^{1/2}, \quad (12)$$

$\hbar^2 k^2 / 2m_c = E$ ,  $E$  определяется из уравнения (5). Волновая функция носителей в валентной зоне описывается соотношением (1), в котором  $m_c$  заменяется на эффективную массу дырок  $m_v$ .

Выражение для коэффициента поглощения света частоты  $\Omega$  может быть записано в виде

$$K(\Omega) = \frac{(2\pi)^2 e^2 (P_{cv} \xi) N_s}{m_0^2 \Omega n_0 c a} \sum_{nk_{\perp s}} |M_{nk_{\perp s}}|^2 \delta \left\{ \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_v} \hbar^2 + \frac{\hbar^2 K_{\perp}^2}{2m_v} + E_g + E - \hbar \Omega \right\}, \quad (13)$$

$n_0$  — показатель преломления;  $\xi$  — вектор поляризации электромагнитной волны;  $N_s = N/L_x L_y$  ( $N$  — число примесных центров);  $P_{cv}$  — матричный элемент оператора импульса на блоховских функциях зонных носителей;  $E_g$  — ширина запрещенной зоны исследуемого полупроводникового материала;  $E = E_0 (2/\pi \cdot \arccos \alpha_1)^2$ , если  $z_0 = a/2$ .

Расчет матричного элемента  $M_{nk_{\perp s}}$  на волновых функциях начального (1) и конечного (12) электронных состояний проводится элементарно

$$|M_{nk_{\perp s}}|^2 = \frac{2^3 a^2 (ka) \sin(ka)}{\pi^3 L_x L_y \sin(z_0 k) \sin\left[1 - \frac{z_0}{a}\right](ka)} \times \frac{\left(\sin\left(\frac{\pi n z_0}{a}\right)\right)^2}{\left[n^2 + \left(\frac{ak_{\perp}}{\pi}\right)^2 + \left(\frac{ka}{\pi}\right)^2\right]^2}. \quad (14)$$

После подстановки (14) в (13) и интегрирования по квазиимпульсу  $k_1$  коэффициент поглощения принимает вид

$$K(\Omega) = K_0 \sum_n \frac{\sin^2 \left( \frac{\pi n z_0}{a} \right) \tilde{E}_0^2}{\left[ \hbar\Omega - E_G - E \left( 1 + \frac{m_c}{m_v} \right) \right]^2} \Theta \left( \frac{\hbar\Omega + E - E_g}{E_0} - n^2 \right), \quad (15)$$

$$K_0 = \frac{2^4 e^2 N_s (P_{cv} \xi)^2}{m_0^2 \Omega n_0 c \tilde{E}_0 a} \frac{(ka)}{\sin(k\xi_0) \sin \left[ 1 - \frac{\xi_0}{a} \right] (ka)}, \quad \tilde{E}_0 = \frac{\mu_c}{\mu_v} E_0,$$

$Q(x)$  — ступенчатая функция Хевсайда. Если примесь расположена в центре размерно-квантованной пленки  $z_0 = a/2$ , то

$$K_0 = \frac{2^5 e^2 (P_{cv} \xi)^2 N_s}{m_0^2 \Omega n_0 c \tilde{E}_0 a} (2 \arccos \alpha_1) \frac{\alpha_1}{\sqrt{1 - \alpha_1^2}}. \quad (16)$$

Для того чтобы наблюдалось поглощение света, необходимо выполнение естественного неравенства  $|E_0 - E| \gg k_0 T$ . При  $T = 4$  К,  $a_0^{-2} = 0.25 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ ,  $m_c = 0.07 m_0$  последнее неравенство хорошо выполняется уже при  $a < 300 \text{ \AA}$ . Для перехода из  $n=1$  валентной зоны в РИСС легко получить ( $\hbar\Omega \geq E + E_g + h^2 \pi^2 / 2m_v a^2$ )

$$K(\Omega) = K_1(\Omega) \frac{2^4 N_s a^2}{\pi^3} \left[ \frac{\tilde{E}_0}{\hbar\Omega - E_g - E \left( 1 + \frac{m_c}{m_v} \right)} \right]^2 (ka) \frac{m_v}{\mu} \text{ctg} \left( \frac{ka}{2} \right), \quad (17)$$

$$K_1(\Omega) = \frac{2\pi e^2 E_g}{\Omega n_0 c a \hbar^2}, \quad \mu = \frac{m_c m_v}{m_c + m_v},$$

$K_1(\Omega)$  — коэффициент поглощения неполяризованного света ( $\hbar\Omega \geq E_g + h^2 \pi^2 / 2\mu a^2$ ), определяемый переходом электрона из нижней валентной зоны в зону проводимости. Для разумных значений параметров при  $a = 200 \text{ \AA}$ ,  $\hbar\Omega = E_g + h^2 \pi^2 / 2\mu a^2$   $K_1(\Omega) = 6.6 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$ , а  $K(\Omega) \sim 70 \text{ см}^{-1}$  (при  $N_s = 10^8 \text{ см}^{-2}$ ), что вполне доступно для экспериментального измерения коэффициента поглощения света в длинноволновой области спектра. Как непосредственно следует из (15), частотная зависимость коэффициента поглощения света носит, как и в случае зоно-зонного перехода, ступенчатый характер.

Для мелких акцепторных состояний (в объемном полупроводнике это известные  $A^+$  центры [6]) возможны переходы электрона из зоны проводимости на РИСС с излучением света на частотах ( $\hbar\Omega \geq E_g - E + h^2 \pi^2 / 2m_c a^2$ ) (новый канал излучательной рекомбинации). Как показывают расчеты, время жизни излучательной рекомбинации на РИСС определяется соотношением

$$\tau_{\text{изл}} = \tau_{\text{изл}}^0 \left( \frac{\pi}{2} \right)^3 \left[ 1 - \left( \frac{2}{\pi} \arccos \alpha_1 \right)^2 \right]^2 (N_s a^2)^{-1} \frac{E_g + h^2 \pi^2 / 2\mu a^2}{E + E_0 + E_g},$$

$$\tau_{\text{изл}}^{(0)-1} = \frac{2e^2 n_0 E_g}{c^3 \hbar^2 \mu} \left( E_g + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2\mu a^2} \right), \quad (18)$$

$$\beta E_0 = \frac{1}{k_0 T} E_0 \gg 1,$$

$E$  находится из уравнения (5),  $\tau_{\text{изл}}^0$  — время жизни излучательной рекомбинации в РКП. Для типичных параметров  $m_c = 0.06m_0$ ,  $m_v = 0.45m_0$ ,  $E_g = 1.52$  эВ,  $a = 200$  Å  $\tau_{\text{изл}}^0 \sim 2 \cdot 10^{-10}$  с,  $\tau_{\text{изл}} \sim 0.5\tau_{\text{изл}}^0$  при  $N_s = 5 \cdot 10^{10}$  см<sup>-3</sup>. Следовательно, РИСС могут активно влиять на кинетику фотопроводимости в РКП.

#### Список литературы

- [1] Кревчик В. Д., Ималов З. З. // ФТП. 1983. Т. 17. № 7. С. 1235—1241.
- [2] Синявский З. П. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 4. С. 1307—1309.
- [3] Демков Ю. Н., Друкарев Г. Ф. // ЖЭТФ. 1965. Т. 49. № 2. С. 257—264.
- [4] Прудников А. П., Брычков Ю. А., Марычев О. И. Интегралы и ряды. М.: Наука, 1981. 798 с.
- [5] Демков Ю. Н., Островский В. Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л., 1975. 240 с.
- [6] Gershenson E. M., Melnikov A. P., Rabinovich H. // *Lake impurity centers, molecular complex and electron delocalization in semiconductors. Elektron-elektron interactions in disordered sistem* // Ed. M. Rollak, A. L. Efros. 1985. P. 483—554.

Институт прикладной физики  
АН Молдовы  
Кишинев

Поступило в Редакцию  
26 июня 1991 г.