1989 PHYSICS AND TECHNICS OF SEMICONDUCTORS vol. 23, N 5

ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ НА ДЕФЕКТАХ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СВЕРХРЕШЕТКИ

Гашимзаде Н. Ф., Ивченко Е. Л., Кособукин В. А.

Построена теория электронных состояний, локализованных в одном измерении на дефектах полупроводниковой сверхрешетки. Такими дефектами могут быть различные нарушения периодичности сверхструктуры, при которых, однако, сохраняется однородность в плоскости слоев: нестандартная квантовая яма или барьер с иной шириной слоя или с иным составом, смещение гетерограницы и т. д. С помощью метода матриц перехода выведено уравнение для энергии локализованного электрона. Для некоторых типов дефектов рассчитаны энергия связи и длина локализации электрона. Отдельно проанализированы дефекты с малой энергией связи, когда применим метод эффективной массы электрона в сверхрешетке.

В полупроводниковых сверхрешетках (СР) с дефектами возможны состояния носителей тока или коллективных возбуждений, локализованных в одном измерении (локализованные плазмоны в СР рассматривались, например, в [1-3]). Такими дефектами могут быть различные нарушения периодичности сверхструктуры, при которых, однако сохраняется однородность в плоскости слоев: нестандартные квантовые ямы или барьеры с иной шириной слоя либо с иным составом, смещение гетерограницы в СР (одна из ям расширена, прилегающий к ней барьерный слой сужен так, что их суммарная ширина не изменяется) и т. д. Эти дефекты могут быть встроены в СР целенаправленно и могут служить конструктивными элементами структур квантовой микроэлектроники [4] или возникать случайно в процессе выращивания структуры.

В данной работе теоретически исследованы электронные состояния, локализованные в СР в одном измерении. Для некоторых типов дефектов полупроводниковой СР рассчитаны энергия связи и длина локализации электрона в зависимости от параметров этих дефектов. Результаты расчета, применимые и к дыркам, могут быть полезны при изучении формы полосы фотолюминесценции, низкотемпературной фотопроводимости и других оптических свойств неидеальных сверхрешеток, а также гетероструктур в виде одиночной квантовой ямы с примыкающими к ней с обеих сторон сверхрешетками [4].

Изучение одномерной локализации [5] в СР представляет и общефизический интерес, так как именно с СР связана возможность создавать дефекты заданного типа с заданной одномерной неупорядоченностью [6]. Существенно, что как сверхструктура, так и дефекты СР имеют макроскопический масштаб, вследствие чего детали микроскопической неупорядоченности, обусловленной примесями, можно считать незначительными.

1. Уравнение для энергии локализованного электрона

Для проведения численного расчета для композиционной СР $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ рассмотрим структуру, составленную из слоев типа A (квантовая яма) и B (барьер) с эффективными массами m_A и m_B в соответствующих объемных материалах. С учетом однородности этой структуры в плоскости xy решение уравнения Шредингера для огибающей волновой функции электрона в СР в методе эффективной массы ищем в виде

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{i(q_x x + q_y y)} \psi(z). \quad (1)$$

На каждом гетеропереходе на функцию $\psi(z)$ накладываем используемые обычно граничные условия [7]

$$\psi_{\text{л}} = \psi_{\text{п}}, \quad \left(\frac{1}{m(z)}\frac{d\psi}{dz}\right)_{\text{л}} = \left(\frac{1}{m(z)}\frac{d\psi}{dz}\right)_{\text{п}}. \tag{2}$$

Здесь индексы «л» и «п» характеризуют среду, расположенную соответственно слева и справа от гетерограницы, которая перпендикулярна оси z.

Для указанных в начале статьи дефектов существуют две плоскости $z=z_+$ и $z=z_-$ $(z_- < z_+)$, такие, что области $z < z_-$ и $z > z_+$ заняты чередующимися слоями типа A и B, имеющими толщину a и b соответственно, а область дефекта $z_- < z < z_+$ состоит из конечного числа слоев A и B толщиной $d_1, \ldots, d_N$.

Уравнение для энергии локализованного электрона E можно получить, «сшивая» в точках z_- и z_+ решение $\psi(z)$ в области дефекта $z_- < z < z_+$ с решениями в регулярных областях, затухающими при $z \to \pm\infty$. Последние совпадают с решениями уравнения Шредингера для идеальной СР, удовлетворяющими соответственно условиям

$$\psi^{(\pm)}(z+a+b) = e^{\mp\beta(a+b)}\psi^{(\pm)}(z), \tag{3}$$

где $\operatorname{Re}\beta > 0$ и β удовлетворяет дисперсионному уравнению

$$\operatorname{ch}\beta(a+b) = \cos ka \operatorname{ch}\varkappa b + {}^1/_2(\eta - \eta^{-1}) \sin ka \operatorname{sh}\varkappa b, \tag{4}$$

$$k = \left(2m_A E\hbar^{-2} - q^2\right)^{1/2}, \quad \varkappa = \left[2m_B(V-E)\hbar^{-2} + q^2\right]^{1/2}, \quad \eta = \frac{m_A}{m_B}\frac{\varkappa}{k}, \tag{5}$$

V — величина потенциального барьера на гетерогранице. Заметим, что величина $(\operatorname{Re}\beta)^{-1}$ определяет длину проникновения локализованного на дефекте электрона в СР. Далее рассматриваются состояния с энергией ниже дна нижайшей мини-зоны. В этом случае правая часть уравнения (4) превышает единицу, и это уравнение имеет вещественное решение $\beta(E, q)$. В верхних запрещенных мини-зонах, в которых правая часть (4) принимает значения, меньшие (-1), величина β содержит мнимый вклад $i\pi/(a+b)$, определяемый однозначно с точностью до $2\pi in/(a+b)$, где n — целое число [см. (3), (4)].

Введем безразмерные матрицы перехода $\hat{t}_i$, связывающие пары значений ψ и $\varphi = (m_A/m_i)\,k^{-1}\,(d\psi/dz)$ на левой и правой границах i-го слоя.

Для слоя типа A или B толщиной d эти матрицы имеют вид

$$\hat{t}_A(d) = \begin{pmatrix} \cos kd & \sin kd \\ -\sin kd & \cos kd \end{pmatrix}, \quad \hat{t}_B(d) = \begin{pmatrix} \operatorname{ch}\varkappa d & \eta^{-1}\operatorname{sh}\varkappa d \\ \eta\operatorname{sh}\varkappa d & \operatorname{ch}\varkappa d \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Учитывая непрерывность функций ψ и φ на гетерограницах, находим связь между $\psi^{(+)}$ и $\psi^{(-)}$:

$$\begin{pmatrix} \psi^{(+)}(z_+) \\ \varphi^{(+)}(z_+) \end{pmatrix} = \hat{t}\begin{pmatrix} \psi^{(-)}(z_-) \\ \varphi^{(-)}(z_-) \end{pmatrix}, \tag{7}$$

где $\hat{t}$ — матрица перехода через всю дефектную область:

$$\hat{t} = \prod_{i=1}^{N} \hat{t}_i(d_i). \tag{8}$$

Из условия разрешимости (7) следует уравнение для энергии локализованных электронных состояний

$$W^{(+)}(z_+) = \frac{t_{21} + t_{22}W^{(-)}(z_-)}{t_{11} + t_{12}W^{(-)}(z_-)}, \tag{9}$$

где величины $W^{(\pm)} = \varphi^{(\pm)}/\psi^{(\pm)}$ на гетерограницах AB и BA определяются соотношениями

$$W_{AB}^{(\pm)} = -W_{BA}^{(\mp)} = \frac{\cos ka - e^{\pm\beta(a+b)}\operatorname{ch}\varkappa b}{\sin ka + \eta^{-1}e^{\pm\beta(a+b)}\operatorname{sh}\varkappa b} = \frac{e^{\mp\beta(a+b)} - \cos ka \operatorname{ch}\varkappa b - \eta\sin ka\operatorname{sh}\varkappa b}{\sin ka\operatorname{ch}\varkappa b + \eta^{-1}\cos ka\operatorname{sh}\varkappa b}. \tag{10}$$

Заметим, что в (10) первое равенство следует из симметрии идеальной СР к замене z на $(-z)$, а последнее равенство есть иная форма записи дисперсионного уравнения (4).

Развитый формализм применим и к дефектам с непрерывным или квазинепрерывным распределением параметров $m(z)$ и $V(z)$ в области $z_- < z < z_+$ (аналогичный подход известен в оптике слоистых систем [8]). В этом случае

$$\hat{t} = T \exp\left(\int_{z_-}^{z_+} \hat{M}(z)\, dz\right),$$

где

$$\hat{M}(z) = \begin{pmatrix} 0 & \varkappa(z)/\eta(z) \\ \varkappa(z)\eta(z) & 0 \end{pmatrix},$$

а T — оператор упорядочения по z.

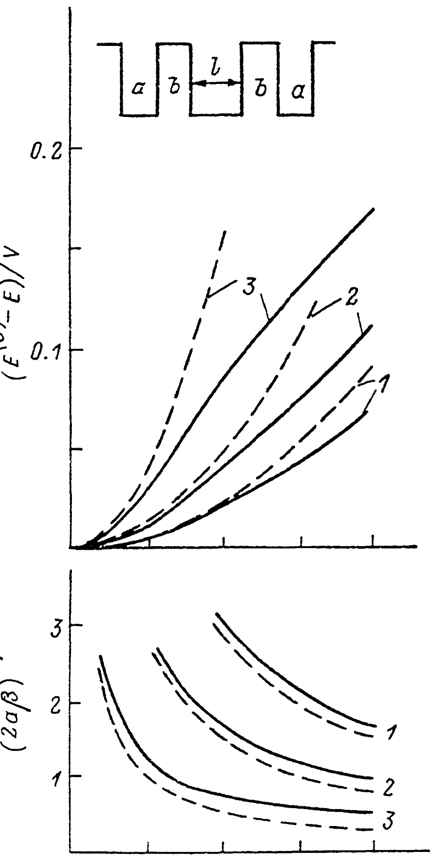

Рис. 1. Зависимость от l энергии связи $E^{(0)}-E$ и длины локализации β^{-1} электрона на дефекте «нестандартная яма» (см. вставку).

Расчет проводился для СР $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ с $a=b$ при $x=0.35$ ($V=0.249$ эВ) и $a=15$ (*1*), 20 (*2*), 30 Å (*3*). Сплошные кривые рассчитаны по точным формулам (4), (11), штриховые — по приближенным формулам (18), (20).

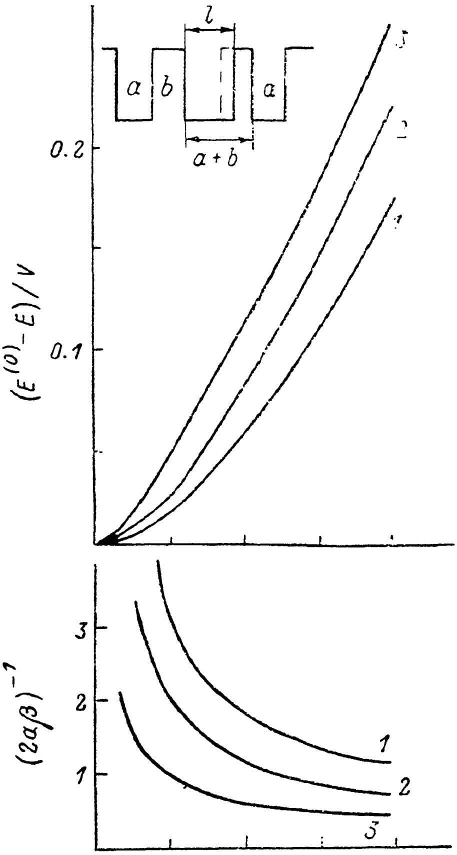

Рис. 2. Зависимость от l энергии связи и длины локализации электрона на дефекте смещения гетерограницы в СР $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ (см. вставку).

Расчет энергии проводился по формуле (12) при $x=0.35$ ($V=0.249$ эВ) и при $a=b=15$ (*1*), 20 (*2*), 30 Å (*3*).

2. Расчет энергии связи и длины локализации

Применим общие формулы (8)—(10) для анализа электронных состояний на дефектах типов *1*—*3*, показанных на вставках к рис. 1—3 соответственно. В случаях *2* и *3* дефектная яма уширена (асимметрично и симметрично) за счет уменьшения ширины соседних барьеров так, что правая от дефекта регулярная часть СР не сдвигается относительно левой. В случае *1* имеется сдвиг на длину, не кратную периоду СР, так как барьеры при этом остаются неизменными. Как следствие, возмущение гамильтониана (изменение потенциальной энергии и эффективной массы электрона) по сравнению с идеальной СР ограничено вдоль оси z для дефектов *2*, *3* и не локализовано для дефекта *1*.

В каждом из трех указанных случаев от дна нижней мини-зоны отщепляется по крайней мере один локальный уровень [точнее, двумерная подзона локализованных состояний $E(q)$ с дисперсией по $\mathbf{q}=(q_x, q_y)$]. При учете симметрии или других свойств дефекта уравнение (9) для дисперсии $E(q)$ существенно упрощается. Так, четные состояния, локализованные на дефекте «расширенная яма» (рис. 1), определяются уравнением

$$\operatorname{tg}(kl/2) + W_{AB}^{(+)} = 0, \tag{11}$$

которое получается из (9) после подстановки $W^{(+)}(z_+) = W_{AB}^{(+)}$, $W^{(-)}(z_-) = W_{BA}^{(-)}$, $t_{11} = t_{22} = \cos kl$, $t_{12} = -t_{21} = \sin kl$ и учета соотношения $W_{AB}^{(+)} = -W_{BA}^{(-)}$.

Для дефекта смещения гетерограницы (рис. 2) матрицу $\hat{t} = \hat{t}_B(b-c)\,\hat{t}_A(c)$,

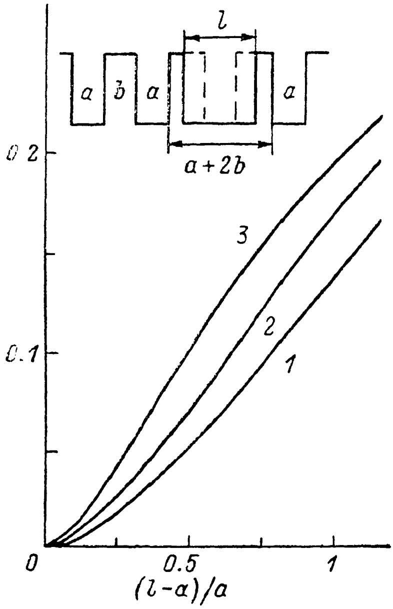

Рис. 3. Зависимость от l энергии связи электрона на дефекте с симметричным смещением двух соседних гетерограниц в СР GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ (см. вставку).

Расчет энергии проводился по формуле (13) при $x=0.35$ и $a=b=15$ (*1*), 20 (*2*), 30 Å (*3*). Зависимость β^{-1} от l в этом случае практически совпадает с аналогичной зависимостью на рис. 2.

где $c=l-a$, удобно переписать в виде $\hat{t}_B(b)\,\hat{t}_B^{-1}(c)\,\hat{t}_A(c)$. Это позволяет представить уравнение (9) для энергии локализованного электрона в форме

$$W_{AB}^{(+)} = \frac{t'_{21} + t'_{22}W_{AB}^{(-)}}{t'_{11} + t'_{12}W_{AB}^{(-)}}, \tag{12}$$

где $\hat{t}' = \hat{t}_B^{-1}(c)\,\hat{t}_A(c)$. При такой записи уравнения легко убедиться в предельном переходе $\beta \to 0$, $E_1(q) \to E_0(\mathbf{Q}_q)$ при $c=l-a \to 0$, где $E_0(\mathbf{Q})$ — дисперсия электрона в нижней мини-зоне идеальной СР, $\mathbf{Q}_q=(q_x, q_y, 0)$. Для дефекта на рис. 3 (симметричное смещение двух соседних гетерограниц) получаем

$$W_{AB}^{(+)} = \frac{1}{2\bar{t}_{12}}\left[\bar{t}_{11} + \bar{t}_{22} \pm \sqrt{(\bar{t}_{11} + \bar{t}_{22})^2 - 4\bar{t}_{12}\bar{t}_{21}}\,\right], \tag{13}$$

где $\bar{t} = \hat{t}_B^{-1}(\bar{c})\,\hat{t}_A(a+2\bar{c})\,\hat{t}_B^{-1}(\bar{c})$, $\bar{c} = (l-a)/2$, верхний и нижний знаки отвечают нечетным и четным состояниям соответственно.

Результаты расчета энергии связи $E^{(0)}-E$ и длины локализации β^{-1} для нижнего локализованного состояния при $q=0$ изображены на рис. 1—3. Здесь $E^{(0)}$ — энергия электрона на дне нижней мини-зоны, т. е. $E_0(\mathbf{Q}=0)$. Расчет во всех случаях проводился для СР GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ при $a=b$ для состава $x=0.35$, когда $V=0.249$ эВ, $m_B=1.43\ m_A$ [7] [$m_A \equiv m$ (GaAs)$=0.067\ m_0$, m_0 — масса свободного электрона]. Как и должно быть, во всех случаях $E^{(0)}-E \to 0$ и $\beta^{-1} \to \infty$ при $l \to a$. Дисперсия $E(q)$ характеризуется эффективной массой, значение которой заключено между m_A и m_B.

3. Анализ области малых значений $|E^{(0)}-E|$

Представляет интерес проанализировать отдельно область энергий вблизи $E^{(0)}$ для блоховских ($E \geqslant E^{(0)}$) и локализованных ($E < E^{(0)}$) электронов в СР. В окрестности $E^{(0)}$ энергетический спектр электрона в идеальной СР

$$E = E^{(0)} + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_\parallel} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_\perp}, \tag{14}$$

где K — проекция волнового вектора электрона $\mathbf{Q}$ в СР на ось z, $\mathbf{q}$ — составляющая вектора $\mathbf{Q}$, перпендикулярная оси z. Это выражение получено из (4) после замены $\operatorname{ch}\beta\,(a+b)$ на $\cos K\,(a+b)$ и разложения вблизи дна мини-зоны. Для эффективной массы $m_\parallel$ справедлива формула

$$m_\parallel = m_A \frac{\operatorname{sh} \varkappa_0 b}{k_0 (a+b)} \frac{1}{C_A^2}\left(\eta_0 + \frac{1}{\eta_0}\right), \tag{15}$$

где

$$C_A^2 = \frac{2(a+b)}{a\left(1 + \dfrac{\sin k_0 a}{k_0 a}\right) + b\left(1 + \dfrac{\operatorname{sh} \varkappa_0 b}{\varkappa_0 b}\right)\dfrac{1+\cos k_0 a}{1+\operatorname{ch}\varkappa_0 b}}, \tag{16}$$

k_0, $\varkappa_0$ и η_0 — значения k, $\varkappa$ и η из (5), вычисленные при $E^{(0)}=E$, $q=0$.

Заметим, что волновая функция электрона в СР на дне нижней мини-зоны имеет простой вид

$$\psi_0(z) = \begin{cases} C_A \cos k_0 (z - \bar z_A) & \text{в слое } A, \\ C_B \operatorname{ch} \varkappa_0 (z - \bar z_B) & \text{в слое } B, \end{cases} \tag{17}$$

где $\bar z_{A,B}$ — координата центра соответствующего слоя. Из граничных условий (2) следует, что

$$C_A \cos (k_0 a/2) = C_B \operatorname{ch} (\varkappa_0 b/2).$$

При нормировке

$$\int\limits_{a+b} dz\, |\psi_0(z)|^2 = a + b$$

коэффициент C_A определяется соотношением (16) и входит в выражение (15) для массы $m_\parallel$.

Согласно принципам метода эффективной массы, для состояний с энергией E вблизи $E^{(0)}$ волновую функцию электрона в СР (в области $z < z_-$ или $z > z_+$) можно приближенно представить в виде $\psi(z) = F(z)\,\psi_0(z)$, где функция $\psi_0(z)$ определена в (17), а огибающая $F(z)$ для локализованных состояний пропорциональна $\exp(\beta z)$ при $z < z_-$ и $\exp(-\beta z)$ при $z > z_+$, где при $\beta\,(a+b) \ll 1$

$$\beta = [2m_\parallel (E^{(0)} - E)^{1/2}\, \hbar^{-1}]. \tag{18}$$

В том же приближении для значений волновой функции ψ и функции $m^{-1}(z)\times \times (d\psi/dz)$ на гетерограницах получаем

$$\begin{gathered} \psi_{AB} = \cos (k_0 a/2)\, C_A F_{AB}, \\ \left(\frac{1}{m(z)} \frac{d\psi}{dz}\right)_{AB} = -\frac{k_0}{m_A} \sin (k_0 a/2)\, C_A F_{AB} + \frac{1}{\cos (k_0 a/2)\, C_A m_\parallel} \left(\frac{dF}{dz}\right)_{AB}; \end{gathered} \tag{19а}$$

$$\begin{gathered} \psi_{BA} = \cos (k_0 a/2)\, C_A F_{BA} - \frac{2 \sin (k_0 a/2)}{C_A m_\parallel} \frac{m_A}{k_0} \left(\frac{dF}{dz}\right)_{BA}, \\ \left(\frac{1}{m(z)} \frac{d\psi}{dz}\right)_{BA} = \frac{k_0}{m_A} \sin (k_0 a/2)\, C_A F_{BA} + \frac{\cos (k_0 a)}{\cos (k_0 a/2)\, C_A m_\parallel} \left(\frac{dF}{dz}\right)_{BA}. \end{gathered} \tag{19б}$$

Можно убедиться в том, что выражения (19а), (19б) согласуются с требованием сохранения нормальной составляющей плотности потока частиц на границе между объемным слоем типа A или B и сверхрешеткой или на границе между двумя различными сверхрешетками.

Обращает на себя внимание то, что коэффициент, связывающий в (19а), (19б) ψ и F, в общем случае отличен от единицы, а значение $m^{-1}(z)(d\psi/dz)$ на гетерогранице зависит от значений на этой границе как производной dF/dz, так и самой функции F. Этот результат позволяет понять, что и сами исходные граничные условия (2) носят приближенный характер: в общем случае значения $\psi_{\text{л}}$ и $(m^{-1}d\psi/dz)_{\text{л}}$ на границе слева должны сшиваться с некоторыми линейными комбинациями $\psi_{\text{п}}$ и $(m^{-1}d\psi/dz)_{\text{п}}$.

Из (18), (19а), (19б) получаем следующее приближенное выражение для энергии связи электрона на дефекте «нестандартная яма»:

$$E^{(0)}-E=\frac{E^{(0)}}{8}\left(\frac{l-a}{a+b}\right)^2\frac{m_A}{m_\parallel}\left[\operatorname{ch}2\varkappa_0 b-1\right]\left(\eta_0+\frac{1}{\eta_0}\right)^2. \tag{20}$$

Штриховые кривые на рис. 1 построены по формулам (18), (20). Видно, что при $(l-a)/a \ll 1$ точные и приближенные зависимости $E(l)$ или $\beta(l)$ близки.

4. Заключительные замечания

Мы проанализировали ситуации, когда дефект образуется в результате изменения ширины одного или нескольких прилегающих друг к другу слоев. Аналогично можно рассмотреть более сложные дефекты, включающие в себя слои с составом x', отличающимся от x барьерных слоев в СР. В таких слоях высота барьера и эффективная масса уже отличаются от V и m_B [9].

Рассмотренный в данной работе подход удобен и для анализа поверхностных состояний в полубесконечной СР. Эти состояния аналогичны таммовским уровням в полупроводниковых кристаллах [10]. Следует иметь в виду, что если высота V_0 барьера, ограничивающего СР, не меньше V, то отщепления таммовского уровня от дна нижней мини-зоны СР не происходит. Однако появление поверхностных состояний в верхних запрещенных мини-зонах возможно и при $V_0 \geqslant V$.

Авторы благодарны П. С. Копьеву и И. Н. Уральцеву за полезные обсуждения.

Список литературы

[1] Кособукин В. А. // ФТТ. 1986. Т. 28. В. 7. С. 1965—1969.
[2] Das Sarma S., Kobayashi A., Prange R. E. // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. N 12. P. 1280—1283.
[3] Hawrylak P., Quinn J. J. // Sol. St. Commun. 1986. V. 59. N 11. P. 781—784.
[4] Алфёров Ж. И., Васильев А. М., Иванов С. В., Копьев П. С., Леденцов Н. Н., Луценко М. Э., Устинов В. М. // Письма ЖТФ. 1988. Т. 14. В. 19. С. 1803—1807.
[5] Займан Дж. Модели беспорядка. М., 1982. 592 с.
[6] Merlin R., Bajema K., Clarke R., Juang F.-Y., Bjattacharya P. K. // Phys. Rev. Lett. 1985. V. 55. N 17. P. 1768—1770.
[7] Bastard G. // Phys. Rev. 1981. V. B24. N 10. P. 5693—5697.
[8] Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М., 1970. 856 с.
[9] Ивченко Е. Л., Копьев П. С., Кочерешко В. П., Уральцев И. Н., Яковлев Д. Р. // Письма ЖЭТФ. 1988. Т. 47. В. 8. С. 407—409.
[10] Ансельм А. И. Введение в теорию полупроводников. М., 1978. 615 с.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Получена 12.12.1988
Принята к печати 11.01.1989