

## ЛОКАЛЬНЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ ЯМАХ

© А.А.Пахомов, К.В.Халипов, И.Н.Ясиевич

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия  
(Получена 12 июля 1995 г. Принята к печати 15 июля 1995 г.)

В рамках модели потенциала нулевого радиуса рассмотрены локальные состояния, наводимые дефектами, лежащими внутри квантовых ям. Получено аналитическое решение для волновой функции локализованного носителя, вычислена энергия локального состояния при различном положении дефекта в яме и найдена ее зависимость от параметров ямы и характеристики потенциала. Показано, что для дефекта в яме локализованное состояние существует и в том случае, когда мощность потенциала не достаточна для образования локализованного состояния в объемном материале. Полученные результаты могут быть непосредственно использованы для описания двумерных  $D^-$ -состояний, т.е. электронных состояний, соответствующих присоединению дополнительного электрона к мелкому донору, а также локальных состояний, наводимых изоэлектронными примесями или квантовыми точками предельно малого размера в квантовых слоях.

1. Локальные электронные состояния, наведенные дефектами, лежащими внутри квантовых ям, интенсивно изучаются в настоящее время в связи с развитием технологии  $\delta$ -легирования (см., например, [1,2]). Теоретические работы, посвященные таким состояниям, основывались на различных модификациях вариационного численного анализа [3-6]. В данной работе мы рассмотрим локальные состояния в полупроводниковых квантовых ямах, используя для потенциала дефекта модель потенциала нулевого радиуса. Как будет показано, эта модель позволяет получить аналитическое решение для волновой функции локализованного носителя и проанализировать, как зависят локальные энергетические уровни от положения дефекта в яме и его характеристик в объемном материале.

Полученные результаты могут быть непосредственно использованы при изучении 2-мерных  $D^-$ -состояний, т.е. электронных состояний, соответствующих присоединению дополнительного носителя к мелкому донору. Такие состояния в объемных полупроводниках существуют только в неравновесных условиях, например при фотовозбуждении. В случае доноров, лежащих в квантовых ямах, они могут существовать и в равновесных условиях, так как избыточные носители прибывают в яму при легировании барьерных слоев мелкими примесями. С другой стороны, энергия связи этих состояний существенно возрастает за

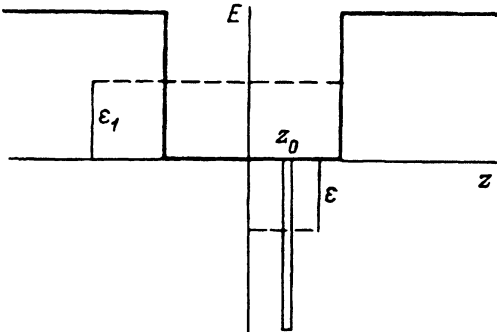


Рис. 1. Дефект в точке  $z_0$  в квантовой яме шириной  $L$ :  $\epsilon_1$  — энергия первого уровня размерного квантования,  $\epsilon$  — энергия локализованного состояния.

счет размерного квантования. Исследованию  $D^-$ -центров посвящена обширная литература, но все теоретические работы основаны на численных расчетах [4,5]. Однако, известно, что модель потенциала нулевого радиуса хорошо применима для рассмотрения как  $D^-$ -состояния, так и состояния отрицательного иона водорода, так как эти состояния являются мелкими (их энергия связи порядка 5% от боровской энергии) и, следовательно, соответствующий радиус локализации связанного электрона существенно больше эффективного радиуса потенциала, так как последний определяется боровским радиусом. Аналогично можно рассматривать и комплексы: экситон плюс избыточный носитель, энергия связи которых в квантовых ямах может быть вполне измеримой величиной.

Другой объект непосредственного приложения рассматриваемой модели — локальные состояния, наводимые изоэлектронными примесями, а также квантовыми точками предельно малого радиуса в квантовых слоях. Такие системы сейчас изучаются в связи с возможным использованием для создания новых оптоэлектронных приборов.

С другой стороны, аналитические решения, построенные в рамках потенциала нулевого радиуса, могут служить основой для качественного анализа и 2-мерных локальных состояний более сложной природы.

2. Волновая функция электрона, локализованного на короткодействующем потенциале, находящемся в точке  $\mathbf{R} = (0, 0, z_0)$  в квантовой яме, определяется одноэлектронной функцией Грина к уравнению Шредингера:

$$\Psi_\epsilon(\rho, z, z_0) = AG(\epsilon, \rho, z, z_0). \quad (1)$$

Здесь  $G(\epsilon, \rho, z, z_0)$  — функция Грина, соответствующая источнику в точке  $\mathbf{R} = (0, 0, z_0)$  и энергии  $\epsilon$ , которую мы будем отсчитывать от дна ямы. Для уровней ниже дна ямы энергия  $\epsilon < 0$ . В качестве оси  $z$  выбрано направление, перпендикулярное яме (см. рис. 1). В силу цилиндрической симметрии задачи функция Грина зависит лишь от  $\rho$  и  $z$  и не зависит от направления 2-мерного вектора  $\rho$  в плоскости ямы.

Функция Грина  $G(\epsilon, \rho, z, z_0)$  должна удовлетворять граничным условиям на краях ямы при  $z = \pm L/2$  ( $L$  — размер ямы), соответствующим непрерывности функции и потока, т.е. обычным условиям для 2-мерных электронных состояний.

С другой стороны, используя основную идею метода короткодействующего потенциала, мы должны потребовать, чтобы асимптотическое поведение волновой функции при  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{R}_0$  (т.е. при  $z \rightarrow z_0, \rho \rightarrow 0$ ) было точно таким, как для локализованного состояния на том же потенциале в объемном полупроводнике, так как факт пребывания дефекта в яме не возмущает потенциал самого дефекта. Это условие можно записать в виде

$$\Psi_\varepsilon(\rho, z, z_0)|_{\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{R}_0} = C \left( \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_0|} - \kappa \right) + O(\mathbf{r} - \mathbf{R}_0). \quad (2)$$

Здесь параметр  $\kappa$  определяется энергией связи  $\varepsilon_b$  электронного локализованного состояния на этом же дефекте в объемном материале:

$$\kappa = \sqrt{2m_w \varepsilon_b} / \hbar, \quad (3)$$

где  $m_w$  — эффективная масса электрона для объемного полупроводника, отвечающего материалу квантового слоя.

Используя цилиндрическую симметрию, мы представим функцию Грина (1) в виде

$$G(\varepsilon, \rho, z, z_0) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty k dk J_0(k\rho) g \left( \varepsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_w}, z, z_0 \right), \quad (4)$$

где  $J_0(k\rho)$  — функция Бесселя нулевого порядка,  $g \left( \varepsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_w}, z, z_0 \right)$  — одномерная функция Грина, отвечающая источнику в точке  $z_0$  и энергии

$$\varepsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_w} \equiv -\frac{\hbar^2 \beta^2}{2m_w}. \quad (5)$$

Здесь мы ввели параметр  $\beta$ , которым будем пользоваться для удобства далее. Одномерная функция Грина  $g$  должна удовлетворять на границах квантовой ямы граничным условиям

$$\left. \frac{1}{m_w} \frac{\partial g}{\partial z} \right|_{z \rightarrow \pm \frac{L}{2}} = \mp \frac{1}{m_b \hbar} \sqrt{2m_b \left( U + \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m_w} \right)}, \quad (6)$$

где  $m_b$  — эффективная масса в барьере,  $L$  — ширина ямы. Отсчет по оси  $z$  идет от центра ямы (см. рис. 1). Соответствующая одномерная функция Грина легко находится и мы получаем

$$g(\beta, z, z_0) = \frac{m}{\hbar^2 \beta} \left[ e^{-|z-z_0|\beta} + a e^{-z\beta} + b e^{z\beta} \right], \quad (7)$$

$$a = \frac{(1 - \xi)^2 \exp(z_0 \beta - L \beta) - (1 - \xi^2) \exp(-z_0 \beta)}{(1 + \xi)^2 \exp(L \beta) - (1 - \xi)^2 \exp(-L \beta)}, \quad (7a)$$

$$b = \frac{(1 - \xi)^2 \exp(-z_0 \beta - L \beta) - (1 - \xi^2) \exp(z_0 \beta)}{(1 + \xi)^2 \exp(L \beta) - (1 - \xi)^2 \exp(-L \beta)}, \quad (7б)$$

$$\xi \equiv \frac{m_w}{m_b} \frac{\beta \hbar}{\sqrt{2m_b \left( U + \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m_w} \right)}}. \quad (7B)$$

Мы введем еще параметр  $\alpha$  для характеристики положения энергетического уровня локализованного состояния на дефекте в яме:

$$\alpha^2 \equiv 2m\varepsilon/\hbar^2. \quad (8)$$

Следовательно, с учетом (5) мы имеем  $\beta^2 = \alpha^2 + k^2$ .

Используя условия (2) и уравнения (1), (4) и (7), определяющие волновую функцию электрона, локализованного на короткодействующем потенциале в квантовой яме, и интеграл Вебера

$$\int_0^\infty dk \frac{k J_0(k\rho)}{\sqrt{\alpha^2 + k^2}} \exp \left[ -|z - z_0| \sqrt{\alpha^2 + k^2} \right] = \frac{\exp \left[ -\alpha \sqrt{\rho^2 + (z - z_0)^2} \right]}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_0)^2}},$$

мы получаем уравнение для нахождения  $\alpha$ , т.е. положения уровня энергии в зависимости от параметров ямы и положения дефекта  $z_0$ :

$$\alpha L - \int_{\alpha L}^\infty dt \left[ a \exp \left( -\frac{z_0 t}{L} \right) + b \exp \left( \frac{z_0 t}{L} \right) \right] = \kappa L. \quad (9)$$

При выводе (9) мы перешли в выражении (4) от интегрирования по  $k$  к интегрированию по безразмерной переменной  $t = L\beta$  и воспользовались при предельном переходе  $\rho \rightarrow 0$ ,  $z \rightarrow z_0$  тем, что  $J_0(0) = 1$ . Коэффициенты  $a$  и  $b$  в (9) определены (7а) и (7б), при этом  $\beta$  нужно заменить на  $t/L$ . В пределе ямы с бесконечно высокими барьерами, что соответствует нулевым граничным условиям для волновой функции (и, соответственно, для функции Грина) на границах ямы,  $\xi \rightarrow 0$  в уравнениях (7) и соответственно

$$a \rightarrow \frac{2}{\text{sh } t} \left[ \exp \left( \frac{z_0}{L} t - t \right) - \exp \left( -\frac{z_0}{L} t \right) \right],$$

$$b \rightarrow \frac{2}{\text{sh } t} \left[ \exp \left( -\frac{z_0}{L} t - t \right) - \exp \left( \frac{z_0}{L} t \right) \right]. \quad (10)$$

С учетом (10) уравнение для нахождения  $\alpha$  в этом пределе бесконечно высокого барьера для квантовой ямы имеет вид

$$\alpha L - \int_{\alpha L}^\infty dt \frac{\exp(-t) - \text{ch} \left( \frac{2z_0}{L} t \right)}{\text{sh } t} = \kappa L. \quad (11)$$

Уравнение (11) было впервые получено Имамовым и Кривчином [7].

Из уравнений (9) и (11) видно, что при больших значениях энергии связи на дефекте в объемном материале, т.е. в случае сильно локализованного состояния, когда  $\kappa L \gg 1$ ,  $\alpha \rightarrow \kappa$ , соответственно имеем  $(-\varepsilon) \rightarrow \varepsilon_b$ . В этом случае дефект практически не чувствует границы ямы.

Представляется интересным исследовать противоположный предельный случай, когда состояние слабо связано на дефекте в объемном материале.

Рассмотрим вопрос о том, когда исчезает локализованное состояние на дефекте в яме. В работе [7] было ошибочно предположено, что это происходит при  $\alpha = 0$ , т.е. при критическом значении параметра  $\kappa = \kappa_L$ . В общем случае  $\kappa_L$  определено уравнением

$$\kappa_L = \frac{1}{L} \int_0^{\infty} dt \left[ -a \exp\left(-\frac{z_0 t}{L}\right) - b \exp\left(\frac{z_0 t}{L}\right) \right]. \quad (12)$$

При  $\kappa = \kappa_L$  уровень в яме пересекает дно квантовой ямы, но между дном ямы и первым уровнем размерного квантования могут существовать только локализованные состояния. Поэтому локализация на дефекте в яме пропадает лишь после того, как уровень пересекает первый уровень размерного квантования. Отметим, что его положение определяется первым корнем уравнения

$$\operatorname{tg} \frac{t}{2} = \sqrt{\frac{m_b}{m_w}} \frac{\sqrt{w^2 - t^2}}{t}, \quad (13)$$

$$w^2 \equiv \frac{2m_w U L^2}{\hbar^2}. \quad (13a)$$

Так как отсчет энергии мы ведем от дна ямы, для уровней, лежащих выше дна ямы,  $\varepsilon > 0$ , и параметр  $\alpha$ , определенный равенством (8), становится мнимым. Удобнее здесь вместо  $\alpha$  ввести снова вещественный параметр  $\eta \equiv -i\alpha$ , т.е. при  $\varepsilon > 0$

$$\varepsilon = \hbar^2 \eta^2 / 2m_w. \quad (14)$$

При этом удобно контур интегрирования в уравнении (10) разбить на два участка: интегрирование по участку положительной мнимой оси от точки  $t = \alpha = i\eta$  до точки  $t = 0$  и затем по положительной реальной полуоси  $0 \leq t \leq \infty$ . В результате мы приходим к уравнению

$$\int_{\sigma}^{\eta t} dt \Phi(\zeta, z_0, w) = \kappa_L(z_0)L - \kappa L, \quad (15)$$

$$\Phi(\zeta, z_0, w) \equiv \frac{(1 + \zeta^2) \cos\left(2\frac{z_0}{L}t\right) - (1 - \zeta^2) \cos t + 2\zeta \sin t}{(1 - \zeta^2) \sin t + 2\zeta \cos t}, \quad (15a)$$

$$\zeta = \sqrt{\frac{m_w}{m_b}} \frac{t}{\sqrt{w^2 - t^2}}, \quad (15b)$$

где  $w$  определено уравнением (13а). Отметим, что корни знаменателя в выражении для  $\Phi(\zeta, z_0, w)$  совпадают с корнями уравнения (13), определяющего положение уровней размерного квантования. При отсутствии уровня в объемном материале, когда  $\kappa = 0$ , локальный уровень на дефекте в яме ниже первого уровня размерного квантования все еще существует.

Отрицательное значение  $\kappa$  в объемном материале соответствует так называемому «виртуальному» состоянию [8], когда мощность потенциала не достаточна, чтобы создать локальные состояния, и он действует только как рассеиватель. Величина  $\kappa$  при этом определяет сечение рассеяния.

В квантовой же яме дефекты дают локализованные состояния, которые по мере роста  $|\kappa|$  приближаются к первому уровню размерного квантования по экспоненциальному закону. Действительно, интеграл в (15) логарифмически расходится при  $\eta L \rightarrow t_1$ , где  $t_1$  — первый корень уравнения (13) и, соответственно, знаменателя в (15а).

Таким образом, при отрицательных и больших по абсолютной величине значениях  $\kappa$  энергии связи локализованного на дефекте состояния стремятся к нулю по экспоненциальному закону:

$$\varepsilon_b = \frac{\hbar^2}{2m_w L^2} (t_1^2 - \eta^2) \propto \exp \left[ \frac{\kappa L - \kappa_L(z_0)L}{\varphi(t_1, z_0)} \right], \quad (16)$$

$$\varphi(t_1, z_0) = \frac{2 \cos^2 \left( \frac{z_0}{L} t_1 \right)}{1 + \frac{w^2}{w^2 - t_1^2} \frac{\sin t_1}{t_1}}, \quad (16a)$$

где  $t_1$  — первый корень уравнения (13) определяет положение первого уровня размерного квантования

$$\varepsilon_1 = \frac{\hbar^2}{2m_w L^2} t_1^2. \quad (17)$$

В случае бесконечно высокого барьера  $w \rightarrow \infty$ ,  $t_1 \rightarrow \pi$  и соответственно

$$\varphi(t, z_0) = 2 \cos^2 \left( \frac{\pi z_0}{L} \right). \quad (18)$$

3. На рис. 2 представлены результаты численного расчета положения локализованного уровня на короткодействующем потенциале для дефекта, лежащего посередине квантовой ямы, в зависимости от параметра  $\kappa L$ . При этом значение  $m_w/m_b = 0.75$ , что соответствует структуре Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As/GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As. Видно, что при  $w > 10$  мы фактически приходим к пределу бесконечно высокого барьера. Для элктронной квантовой ямы Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As/GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As это соответствует  $L \geq 200 \text{ \AA}$ .

На рис. 3 для демонстрации зависимости энергии локализации от положения дефекта представлены результаты численного расчета для трех различных случаев размещения дефекта в яме  $z_0/L = 0$ ,  $z_0/L = 0.2$ ,  $z_0/L = 0.3$  и  $z_0/L = 0.4$  для случая  $m_w/m_b = 0.75$  и  $w = 10$ , что для квантовой ямы Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As/GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As соответствует  $L = 200 \text{ \AA}$ .

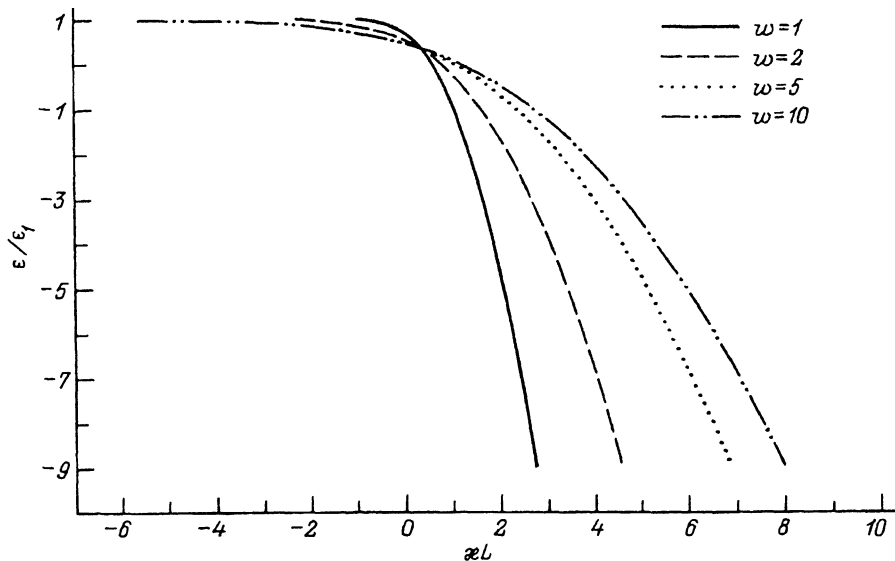


Рис. 2. Энергетическое положение  $\epsilon$  локализованного состояния как функция параметра  $x$  дефекта в объемном материале при различных значениях параметра  $w$ :  $L$  — ширина ямы,  $\epsilon_1$  — энергия первого уровня размерного квантования.

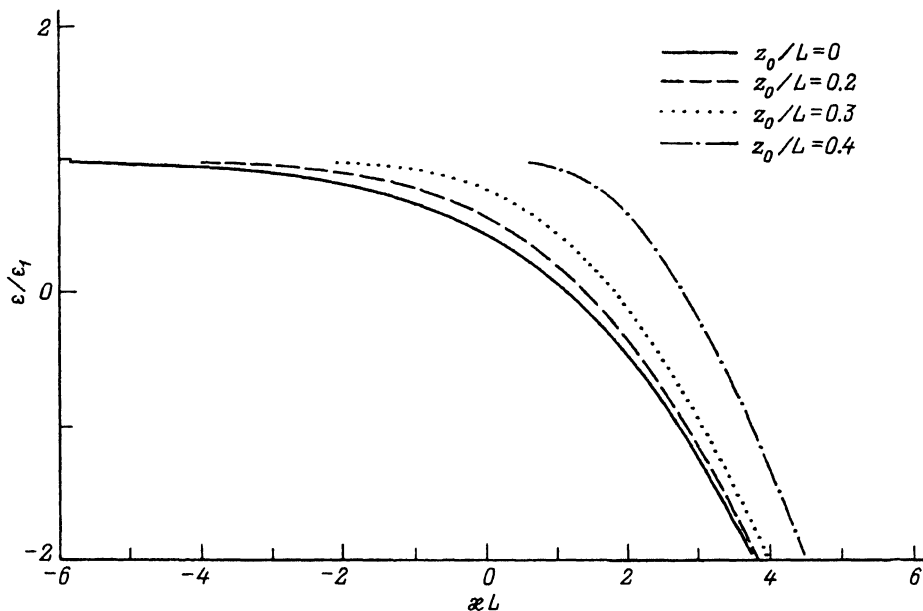


Рис. 3. Энергетическое положение  $\epsilon$  локализованного состояния как функция параметра  $x$  при различных положениях дефекта  $z_0$  в квантовой яме.

4. Мы рассмотрели локализованные состояния на короткодействующем потенциале, расположенном в квантовой яме. Это единственный случай, когда задача о локализованном состоянии может быть решена точно. Продемонстрировано сильное влияние на положение уровня как положения дефекта в яме, так и параметров самой ямы. В соответствии с общей теорией [8] в 2-мерных системах в этой модели связанные состояния с экспоненциально малой энергией связи имеют место даже для 3-мерных потенциалов предельно малой мощности, которые не способны локализовать электроны в объемном материале.

В заключение мы благодарим за финансовую поддержку Международный научный фонд (грант D300) и Российский фонд фундаментальных исследований (грант 94-02-04 415 а).

#### Список литературы

- [1] S. Huan, S.P. Najda. Phys. Rev. Lett. **65**, 1486 (1990).
- [2] T. Pang, S.C. Louie. Phys. Rev. Lett. **65**, 1635 (1990).
- [3] G. Bastard. Phys. Rev. B, **24**, 4714 (1981).
- [4] R.L. Greene, P. Lane. Phys. Rev. B, **34**, 8639 (1986).
- [5] D.M. Larsen, S.Y. McCaun. Phys. Rev. B, **46**, 3966 (1992).
- [6] A.B. Dryubenko, A. Mandray, S. Huan, A.Yu. Sivachenko, B. Etienne. Phys. Rev. B, **50**, 4687 (1994).
- [7] Э.Д. Имамов, В.Д. Кревчик. ФТП, **17**, 1235 (1983).
- [8] Л.Д. Ландау, И.М. Лифшиц. *Квантовая механика* (М., Наука, 1989).

Редактор Т.А. Полянская

#### Local electron states in semiconductor quantum wells

*A.A. Pakhomov, K.V. Khalipov, I.N. Yassievich*

A.F. Ioffe Physicotechnical Institute, Russian Academy of Sciences,  
194021 St. Petersburg, Russia

Local electron states induced by defects that are present inside quantum wells have been considered in the framework of the zero-potential model. An analytical solution is obtained for the wave function of localized states. The local state energy is found as a function of defect positions in quantum well, parameters of quantum well and the potential parameter of the defect in the bulk. It is shown that a localized state exists in the case of defect occurrence in quantum well though the potential power is so small that it is not sufficient for localizing an electron in the bulk. The results obtained can be applied to two-dimensional  $D^-$ -states, i.e. the electron states in the case of shallow donors with an additional electron, as well as to localized states induced by isoelectronic impurities and quantum dots of extremely small size are available in quantum wells.