

Энергетический спектр комплекса $A^+ + e$ в квантовой точке в адиабатическом приближении

© В.Д. Кревчик, А.В. Левашов

Пензенский государственный университет,
440017 Пенза, Россия

E-mail: physics@diamond.stup.ac.ru

(Поступила в Редакцию 14 января 2005 г.
В окончательной редакции 27 мая 2005 г.)

В адиабатическом приближении в рамках метода потенциала нулевого радиуса рассмотрены состояния комплекса $A^+ + e$ в квантовой точке, описываемой моделью потенциала „жестких стенок“. Также комплексы могут возникать в неравновесных условиях (например, при фотовозбуждении). Аналитически получено уравнение, определяющее зависимость энергии связи дырки, локализованной на нейтральном акцепторе, от параметров потенциала структуры и квантового состояния электрона. Показано, что в квантовых точках малого радиуса энергия связи дырки в рассматриваемом комплексе может значительно превышать энергию основного состояния стационарного A^+ -центра.

PACS: 73.21.La, 73.22.-f

Как известно [1,2], возбужденные светом накачки неравновесные электроны и дырки, взаимодействуя с нейтральным акцептором A^0 , могут образовывать как связанные экситоны ($A^0 + \text{экситон}$), так и A^+ -центры. Эксперименты показывают [1], что в случае квантовых ям в структурах GaAs/AlGaAs спектр фотolumинесценции содержит пик, соответствующий излучению с A^+ -центра, и пик рекомбинации экситона, связанного на A^0 -центре. Проблема идентификации этих пиков рассматривалась в [1,2]. В работе [1] было показано, что уменьшение ширины квантовой ямы приводит к возрастанию энергии связи A^+ -центра. Следует ожидать, что в квазинуль-мерных структурах из-за наличия размерного квантования по трем пространственным направлениям кардинальная модификация электронно-дырочных состояний вблизи границ системы будет сопровождаться более значительным ростом энергии связи A^+ -состояний при переходе $2D \rightarrow 0D$.

В настоящей работе рассмотрена ситуация, когда в процессе возбуждения фотolumинесценции светом накачки возможно образование комплекса $A^+ + e$, представляющего собой дырку, локализованную на A^0 -центре, взаимодействующую с электроном, локализованным в основном состоянии квантовой точки (КТ). Действительно, согласно [3], при использовании метода двойного селективного легирования, например, в квантовых ямах сохраняется вероятность присутствия некоторого количества A^0 -центров, с которыми могут эффективно взаимодействовать неравновесные электроны и дырки с образованием комплексов $A^+ + e$. Цель данной работы состоит в вычислении энергии связи дырки в таком комплексе в рамках метода потенциала нулевого радиуса в адиабатическом приближении.

Теория

Интерес к комплексам $A^+ + e$ в наноструктурах обусловлен прежде всего тем, что они наряду со ста-

ционарными A^+ -центрами при определенных условиях могут вносить вклад в фотolumинесценцию. Этот вклад, по-видимому, будет определяться количеством незаполненных A^0 -позиций в процессе двойного селективного легирования [3]. С другой стороны, отличие энергии связи дырки в комплексе $A^+ + e$ от энергии связи стационарного A^+ -состояния может заметно проявиться при больших уровнях легирования [1] (вероятность незаполненных A^0 -позиций велика).

Рассмотрим задачу о связанных состояниях дырки в комплексе $A^+ + e$, помещенном в КТ, потенциал конфинмента которой моделируется сферически-симметричной потенциальной ямой с бесконечными высокими стенками (модель „жестких стенок“). Как известно, движение электрона в поле такой потенциальной ямы описывается волновой функцией вида

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = \Psi_{l,m}(\theta, \varphi) \frac{\sqrt{2}}{R\sqrt{r}} \frac{J_{l+1/2}(K_{l,n}r)}{J_{l+3/2}(K_{l,n}R)}, \quad (1)$$

где $\Psi_{l,m}(\theta, \varphi)$ — нормированные шаровые функции, l, m — орбитальное и магнитное квантовые числа соответственно; величины $K_{l,n}$ определяются условием $J_{l+1/2}(K_{l,n}R) = 0$, где n — порядковый номер корня функции Бесселя $J_\nu(r)$ порядка ν , R — радиус КТ, уровни энергии электрона равны $E_{l,n} = \hbar^2 \pi^2 K_{l,n}^2 / (2m_e^*)$, m_e^* — эффективная масса электрона. Будем предполагать, что в процессе фотовозбуждения дырка объединяется с нейтральным акцептором A^0 с образованием так называемого A^+ -центра. Потенциал A^+ -центра моделируется потенциалом нулевого радиуса мощностью $\gamma = 2\pi\hbar^2 / (\alpha m_h^*)$ (m_h^* — эффективная масса дырки):

$$V_\delta(\mathbf{r}, \mathbf{R}_a) = \gamma \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_a) [1 + (\mathbf{r} - \mathbf{R}_a) \nabla_{\mathbf{r}}], \quad (2)$$

где параметр α определяется энергией связи E_i связанного состояния того же A^+ -центра в массивном полупроводнике, $R_a = (x_a, y_a, z_a)$ — координаты A^+ -центра

в КТ. Взаимодействие электрона, локализованного в основном состоянии КТ, с дыркой, локализованной на A^0 -центре, будем рассматривать в рамках адиабатического приближения. Как известно [4], адиабатическое приближение приводит к задаче о изотропном трехмерном гармоническом осцилляторе. Характерными длинами задачи являются: a_e и a_h — эффективные боровские радиусы электрона и дырки соответственно, R — радиус КТ, λ_n^{-1} — радиус локализации дырки на A^0 -центре, a_n — характерная длина осциллятора. Теоретическое рассмотрение проводится в рамках метода эффективной массы, т. е. в предположении, что все характерные длины велики по сравнению с постоянной решетки. Рассмотрим случай $\lambda_n^{-1} \ll R$ и учтем взаимодействие электрона и дырки, локализованной на A^0 -центре. Электронный потенциал $V_{n,l,m}(r)$, действующий на дырку, можно считать усредненным по движению электрона (адиабатическое приближение), так что на дырку в случае $l = m = 0$ будет действовать сферически-симметричный потенциал вида [4]

$$V_{n,0,0}(r) = \frac{e^2\beta_n}{\varepsilon R} + \frac{m_h^*\omega_n^2 r^2}{2}, \quad (3)$$

где $\beta_n = \gamma_0 - \text{Ci}(2\pi n) + \ln(2\pi n)$, $\gamma_0 = 1.781$ — постоянная Эйлера, $\text{Ci}(x)$ — интегральный косинус, $\hbar\omega_n = [(2\hbar^2\pi^2 n^2 e^2)/(3m_h^* R^3 \varepsilon)]^{1/2}$, ε — диэлектрическая проницаемость КТ.

Уровни энергии такого осциллятора даются в виде [4]

$$E_{n_1, n_2, n_3}^{n,0,0} = -\frac{e^2}{\varepsilon R}\beta_n + \hbar\omega_n \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right), \quad (4)$$

а соответствующие одночастичные волновые функции запишутся следующим образом:

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3}^n(x, y, z) = C_n \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2a_n^2}\right) \times H_{n_1}\left(\frac{x}{a_n}\right) H_{n_2}\left(\frac{y}{a_n}\right) H_{n_3}\left(\frac{z}{a_n}\right), \quad (5)$$

где $C_n = [2^{n_1+n_2+n_3} n_1! n_2! n_3! \pi^{3/2} a_n^3]^{-1/2}$; $a_n = \sqrt{\hbar/(m_h^*\omega_n)}$; $H_n(x)$ — полиномы Эрмита; n_1, n_2, n_3 — квантовые числа, соответствующие энергетическим уровням гармонического осциллятора.

Для определения энергии связи дырки в комплексе $A^+ + e$ в адиабатическом приближении необходимо построить одночастичную функцию Грина $G(r, R_a; E_{\lambda n})$ уравнения Шредингера с гамильтонианом, содержащим потенциалы (2) и (3),

$$G(r, R_a; E_n^{A^+ + e}) = - \sum_{n_1, n_2, n_3} \frac{\Psi_{n_1, n_2, n_3}^{n*}(x_a, y_a, z_a) \Psi_{n_1, n_2, n_3}^n(x, y, z)}{|E_n^{A^+ + e}| + \hbar\omega_n(n_1 + n_2 + n_3)}, \quad (6)$$

где $|E_n^{A^+ + e}| = |E_{\lambda n}| - e^2\beta_n/(\varepsilon R) + 3\hbar\omega_n/2$ — энергия связи дырки в комплексе $A^+ + e$, отсчитываемая от уровня энергии основного состояния осцилляторной сферически-симметричной потенциальной ямы, $E_{\lambda n} = -\hbar^2\lambda_n^2/(2m_h^*)$.

Суммирование в (6) по квантовым числам n_1, n_2, n_3 можно выполнить, воспользовавшись формулой Меллера для производящей функции полиномов Эрмита [5]

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{z}{2}\right)^k \frac{H_k(x)H_k(y)}{k!} = \frac{1}{\sqrt{1-z^2}} \exp\left(\frac{2xyz - (x^2 + y^2)z^2}{1-z^2}\right). \quad (7)$$

Следует отметить, что в рассматриваемом случае число энергетических уровней в осцилляторной потенциальной яме ограничено и существенно зависит от радиуса КТ, координат A^+ -центра и квантового числа n . Как показал компьютерный анализ, из-за достаточно быстрой сходимости рядов в (6) использование формулы Меллера приводит к погрешности 14 и 3% в случае наличия в осцилляторной потенциальной яме соответственно двух и трех энергетических уровней при $n = 1$ (A^+ -центр расположен вблизи границы КТ). При приближении примеси к центру КТ погрешность экспоненциально спадает, что обеспечивает удовлетворительную точность расчета при $R_a = (0, 0, 0)$. Используя стандартную процедуру метода потенциала нулевого радиуса (см., например, [6]), получим уравнение, определяющее зависимость энергии связи дырки $|E_n^{A^+ + e}|$ в комплексе $A^+ + e$ от параметров КТ и квантового числа n , характеризующего состояния электрона в КТ, для случая $R_a = (0, 0, 0)$ (в боровских единицах)

$$\eta_i = \sqrt{|E_n^{A^+ + e}|} + \frac{2}{\sqrt{\gamma_n \pi}} \int_0^{\infty} dt \exp\left(-\frac{\gamma_n t}{2} |E_n^{A^+ + e}|\right) \times \left[(2t)^{-3/2} - (1 - \exp(-2t))^{-3/2} \right], \quad (8)$$

где $E_n^{A^+ + e} = |E_n^{A^+ + e}|/E_h$; $\gamma_n = \sqrt{6R^* R^*}/(2\pi n)$; $R^* = R/a_h$; $\eta_i = \sqrt{|E_i|/E_h}$.

На рис. 1 приведены результаты компьютерного анализа уравнения (8) для случая КТ на основе InSb ($n = 1$). Можно видеть, что энергия связи дырки $E_1^{A^+ + e}$ в комплексе $A^+ + e$ постепенно возрастает с уменьшением радиуса КТ и ростом мощности потенциала нулевого радиуса (параметр η_i) (ср. кривые 1 и 3).

Для эксперимента представляет интерес сравнение энергии связи дырки $|E_n^{A^+ + e}|$ с энергией связи стационарного A^+ -центра $|E_{\lambda}^{A^+}| = |E_{\lambda}| + \hbar^2\pi^2/(2m^*R^2)$ (в отсутствие кулоновского взаимодействия), которая определяется из уравнения (14) работы [7]

$$\eta_i = -\frac{\pi}{R_a^*} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [J_{l+1/2}(i\eta R_a^*)]^2 \frac{N_{l+1/2}(i\eta R^*)}{J_{k+1/2}(i\eta R^*)}, \quad (9)$$

где $\eta = \sqrt{|E_{\lambda}|/E_h}$; $R_a^* = R_a/a_h$; $J_{l+1/2}(z)$ и $N_{l+1/2}(z)$ — соответственно функции Бесселя и Неймана полужелтого порядка. На рис. 2 показана зависимость величины $|E_1^{A^+ + e}|/|E_{\lambda}^{A^+}|$ от радиуса КТ на основе InSb

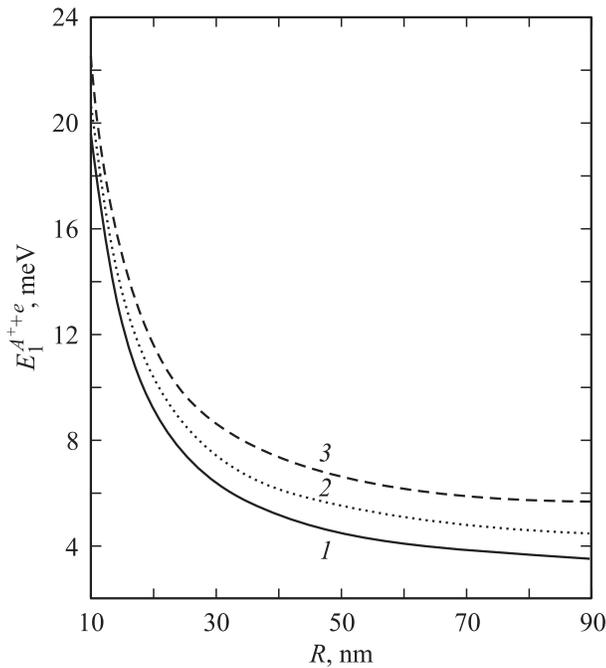


Рис. 1. Зависимость энергии связи дырки в комплексе $A^{++} + e$ от радиуса квантовой точки R для различных значений энергии связи дырки в массивном полупроводнике $|E_i|$. $|E_i|$, meV: 1 — 2.7, 2 — 3.7, 3 — 4.8.

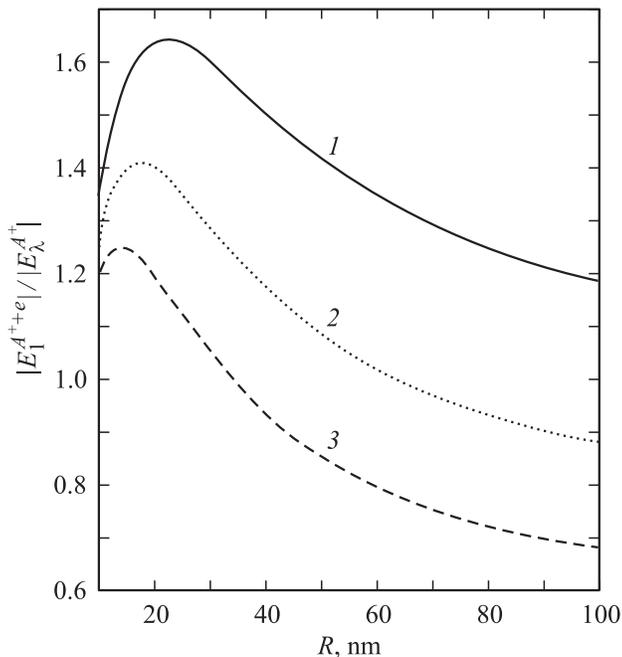


Рис. 2. Зависимость $|E_1^{A^{++}+e}|/|E_\lambda^{A^{++}}|$ от радиуса квантовой точки для различных значений энергии связи в объеме $|E_i|$. $|E_i|$, meV: 1 — 2.7, 2 — 3.7, 3 — 4.8.

($R_a = (0, 0, 0)$). Видно, что в КТ малого радиуса 10–30 nm $|E_1^{A^{++}+e}|/|E_\lambda^{A^{++}}| > 1$ и эта величина возрастает с уменьшением потенциала нулевого радиуса (ср. кривые 3 и 1). Действительно, в случае ком-

плекса $A^{++} + e$ значительный рост величины $|E_1^{A^{++}+e}|$ с уменьшением радиуса КТ R обусловлен существенным влиянием ограничивающего действия „встроенного“ потенциала гармонического осциллятора на A^{++} -состояние. С увеличением мощности потенциала нулевого радиуса влияние кулоновского взаимодействия на A^{++} -состояние ослабевает и $|E_1^{A^{++}+e}|/|E_\lambda^{A^{++}}| < 1$ при больших R .

Таким образом, в настоящей работе показано, что с уменьшением радиуса КТ энергия связи дырки в комплексе $A^{++} + e$ значительно возрастает. Это обстоятельство может оказаться полезным для идентификации стационарных A^{++} -центров и комплексов $A^{++} + e$, возникающих в неравновесных условиях в квазиуль-мерных структурах.

Список литературы

- [1] Ю.Л. Иванов, П.В. Петров, А.А. Тонких, Г.Э. Цырлин, В.М. Устинов. ФТП **37**, 9, 1114 (2003).
- [2] Н.С. Аверкиев, А.Е. Жуков, Ю.Л. Иванов, П.В. Петров, К.С. Романов, А.А. Тонких, В.М. Устинов, Г.Э. Цырлин. ФТП **38**, 2, 222 (2004).
- [3] D. Karsen. Phys. Rev. B **47**, 16, 333 (1993).
- [4] Ал.Л. Эфрос, А.Л. Эфрос. ФТП **16**, 7, 1209 (1982).
- [5] Г. Бейтмен, А. Эрдейн. Высшие трансцендентные функции. Наука, М. (1973). Т. 1, 2.
- [6] В.Д. Кревчик, Р.В. Зайцев. ФТТ **43**, 3, 504 (2001).
- [7] В.Д. Кревчик, А.В. Левашов. ФТП **36**, 2, 216 (2002).