

Энергетический спектр неидеальной квантовой ямы в электрическом поле

© О.Л. Лазаренкова, А.Н. Пихтин

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет, 197376 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 9 февраля 1998 г. Принята к печати 10 февраля 1998 г.)

Рассмотрено влияние электрического поля на энергетический спектр квантовой ямы с макроскопическими флуктуациями. Штарковский сдвиг квазисвязанных состояний в квантовой яме и три зависящих от поля механизма уширения (индуцированное полем однородное уширение, уширение за счет флуктуаций ширины и глубины ямы) рассчитаны в широком диапазоне электрических полей. В качестве примера определено влияние электрического поля на энергетический спектр электронов в квантовой яме GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As шириной 12 нм с флуктуациями ширины и глубины на уровне 5%.

Электрическое поле оказывает существенное влияние не только на процессы переноса заряда, но и на положение и ширину резонансов (уровней размерного квантования) в квантовой яме. Это обязательно должно учитываться при расчете характеристик современных приборов нано- и оптоэлектроники и в ряде случаев может привести к качественно новым результатам.

В реальных гетероструктурах эпитаксиальные слои могут иметь флуктуации толщины δL_z и состава твердого раствора, приводящие к флуктуациям ширины и глубины квантовой ямы. Как обычно, мы будем предполагать, что один из характерных размеров структуры гораздо меньше двух других ($L_z \ll L_x, L_y$). Это позволяет пренебречь квантованием движения электрона в плоскости (x, y) и рассматривать задачу об одномерной квантовой яме, каждому связанному состоянию которой сопоставлены двумерные подзоны, соответствующие кинетической энергии движения носителя в плоскости ямы. При этом эффекты, связанные с микроскопическими флуктуациями состава твердого раствора, не должны отличаться от таковых для трехмерных систем [1,2]. В настоящей работе мы решаем одномерную задачу, считая флуктуации в плоскости ямы (x, y) макроскопическими и рассматривая их аддитивно.

Спектр идеальной гетероструктуры с кусочно-постоянным потенциалом в электрическом поле

Уравнение Шредингера для квантовой ямы, находящейся в электрическом поле F , перпендикулярном плоскости ямы:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) - qFz \right] \psi(E, z) = E\psi(E, z), \quad (1)$$

где m^* — масса, q — заряд частицы, $V(z)$ — кусочно-постоянный потенциал, $\psi(E, z)$ — волновая функция частицы, в общем случае непрерывно зависящая как от координаты, так и от энергии.

При $F = 0$ решением уравнения является дискретный набор собственных энергий и собственных функций,

соответствующих связанным состояниям. Математически такие состояния отвечают полюсам резольвенты гамильтониана. Коль скоро $F \neq 0$, все собственные значения гамильтониана оказываются погруженными в непрерывный спектр, что принципиально отличает их от стационарных состояний при $F = 0$. Полюса резольвенты смещаются с действительной оси в комплексную плоскость. При этом в электронном спектре наблюдаются резонансные пики, называемые резонансами Брейта-Вигнера [3],

$$L_n(E) = |I_n(E)|^2 = C_n / \left\{ 1 + \left(\frac{E - E_n}{\Gamma_n/2} \right)^2 \right\}, \quad (2)$$

совпадающие по форме с лоренцевым контуром. Ширина наблюдаемой линии Γ_n определяется мнимой, а энергия положения резонанса E_n — действительной частью соответствующего собственного значения. Наличие таких ярко выраженных резонансов позволяет говорить о существовании квазисвязанных состояний (уровней размерного квантования) с конечным временем жизни даже в присутствии электрического поля. В формуле (2) n — номер квазисвязанного состояния, C_n — нормировочный коэффициент.

По мере увеличения электрического поля полюса все больше удаляются от вещественной оси, что приводит к увеличению ширины резонансных линий. Возмущения энергетического спектра вблизи квазисвязанных состояний значительно превышают изменения остальной части спектра. Это дает возможность заменить реальный спектр суммой функций вида (2).

Условия полноты и нормировки волновых функций непрерывного спектра выглядят следующим образом:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(E, z) \psi(E, z') dz = \delta(z - z') \quad (3)$$

и

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(E, z) \psi(E', z) dz = \delta(E - E'). \quad (4)$$

Принятое допущение позволяет, подставляя в (3) и (4) волновую функцию частицы в виде

$$\chi(E, z) = \sum_{n=1}^{\infty} I_n(E) \chi_n(z), \quad (5)$$

получить выражения

$$\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \chi_n^*(z) \chi_m(z') \int_{-\infty}^{+\infty} I_n^*(E) I_m(E) dE = \delta(z - z') \quad (6)$$

и

$$\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} I_n^*(E) I_m(E') \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_n^*(z) \chi_m(z) dz = \delta(E - E') \quad (7)$$

соответственно. Здесь под χ_n понимается убывающее на $-\infty$ решение уравнения Шредингера (1), отвечающее энергии резонанса $E = E_n$.

С уменьшением поля Γ_n стремится к нулю, I_n переходит в δ -функцию, и тогда из (6) получаем условия

$$\sum_{n=1}^{\infty} \chi_n^*(z) \chi_n(z') = \delta(z - z') \quad (8)$$

и

$$\int_{-\infty}^{+\infty} I_n^*(E) I_m(E) dE = \delta_{nm}.$$

Из последнего следует

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |I_n(z)|^2 dz = 1. \quad (9)$$

Условие нормировки (9) дает величину $C_n = 2/\pi\Gamma_n$.

Проводя в (7) аналогичный предельный переход, от нормировки бесконечной суммы на δ -функцию можно перейти к известному условию нормировки для n -го связанного состояния:

$$\int |\chi_n(z)|^2 dz = 1. \quad (10)$$

С ростом поля уровень уширяется и его уже нельзя моделировать δ -функцией, однако значения интегралов (9) и (10) остаются неизменными. Поэтому в приближении слабо взаимодействующих уровней данные условия нормировки можно применить и для квазисвязанных состояний в квантовой яме, находящейся во внешнем электрическом поле. Выражение (8) обеспечивает полноту используемого в разложении (5) базиса. Погрешность приближения определяется соотношением между шириной резонансных пиков и расстоянием между ними.

На $+\infty$ интеграл от $|\chi_n(z)|^2$ расходится, поэтому условие нормировки (10) нуждается в регуляризации. Положим $\chi_n = 0$ за пределами некоторого интервала.

С увеличением этого интервала значение коэффициента нормировки волновой функции стабилизируется, так что в качестве пределов интегрирования достаточно взять величину, равную нескольким ширинам ямы. Для расположенных ближе к континууму уровней этот интервал необходимо увеличивать. С другой стороны, интервал насыщения растет из-за увеличения амплитуды функции вне ямы, что соответствует увеличению вероятности туннелирования через треугольный барьер. Однако этот процесс уже учтен через полевое уширение квазисвязанных состояний в (2). Поэтому интервал интегрирования волновой функции при нормировке следует ограничить первым узлом за пределами ямы.

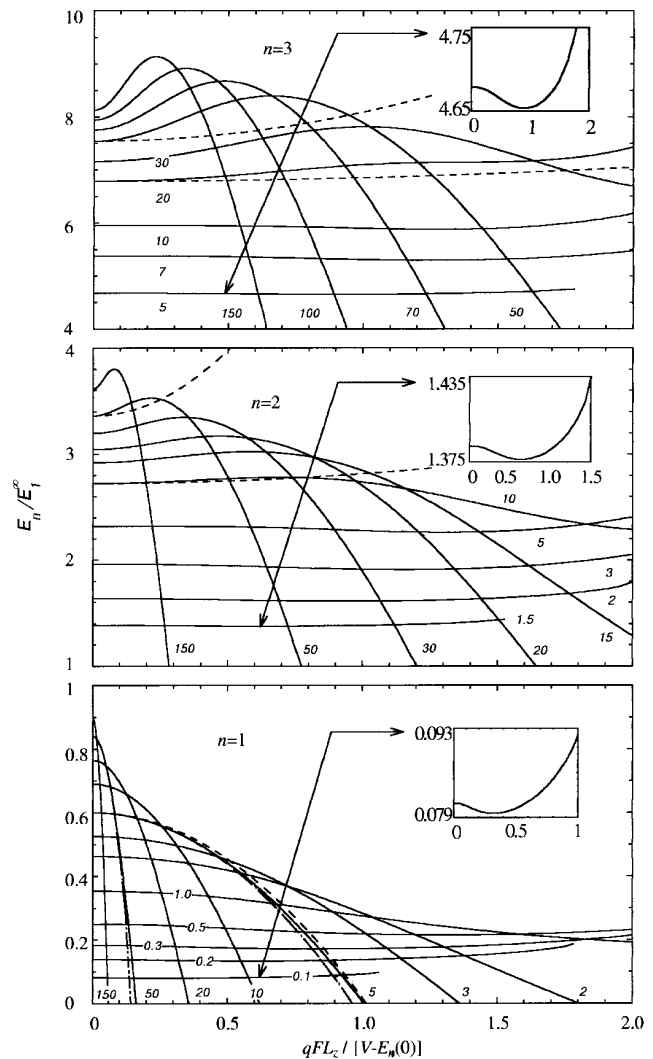


Рис. 1. Зависимость положения первых трех уровней размерного квантования $n = 1, 2$ и 3 в идеальной квантовой яме от электрического поля. Указаны значения параметра безразмерной глубины ямы. Штриховая линия — теория возмущений в приближении бесконечной ямы, штрихпунктирная — квадратичный сдвиг Штарка, рассчитанный вариационным методом в пределе слабых полей. За начало отсчета энергии принят центр дна ямы.

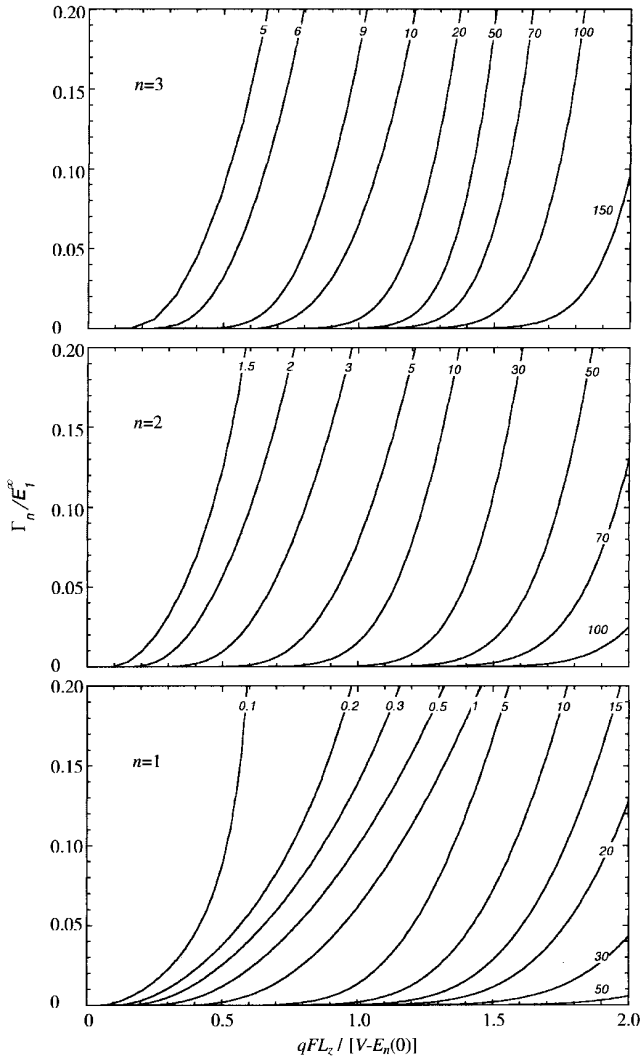


Рис. 2. Зависимость полевого уширения уровней размерного квантования $n = 1, 2$ и 3 от электрического поля. Указаны значения параметра безразмерной глубины ямы.

Для универсализации результатов расчета удобно использовать относительные единицы. Будем измерять координату в z/L_z , где L_z — ширина ямы, а энергию ε — в единицах первого уровня размерного квантования частицы массой m^* в бесконечной яме шириной L_z :

$$E_1^\infty = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* L_z^2}.$$

За начало отсчета примем центр дна ямы. При использовании таких единиц измерения $(n + 1)$ -е состояние появляется в яме глубиной $V/E_1^\infty = \tilde{\nu} = n^2$. Электрическое поле F , определяющее наклон потенциала, удобно измерять в

$$f = qFL_z/[V - E_n(0)],$$

поскольку именно расстояние от уровня до края ямы определяет его положение и ширину. Использование

такой системы единиц позволяет ограничиться рассмотрением полей $f \leq f_0 = 2$, где f_0 соответствует наклону потенциала, при котором n -й уровень оказался бы выше треугольного барьера, если бы не изменял свое положение с ростом поля. Величина f_0 может служить оценкой поля ионизации.

Расчитанные для разной эффективной глубины ямы зависимости положения резонансов и их ширины от электрического поля приведены на рис. 1 и 2 соответственно.

Из рис. 1 видно, что для любого n при безразмерной глубине ямы $(n - 1)^2 < \tilde{\nu} < n^2$ полевая зависимость положения уровня размерного квантования качественно напоминает штарковский сдвиг $1s$ -линии в атоме водорода. В слабых полях даже уровни с $n \geq 2$ сдвигаются вниз по энергии, в то время как теория возмущений в приближении бесконечной ямы предсказывает квадратичный сдвиг в область больших энергий [4]. Появление новых вышележащих состояний приводит к тому, что в слабом поле при $\tilde{\nu} \geq (n + 1)^2$ сдвиг уровня уже может быть описан в приближении бесконечной ямы при использовании рассчитанного для конечной ямы положения уровня в нулевом поле (штриховые линии на рисунке). Слабыми считаются поля, в которых выполняется условие [4,5]

$$\frac{qFL_z}{E_1^\infty} \leq 1, \quad (11)$$

или в используемых единицах

$$f \leq \frac{E_1^\infty}{V - E_n(0)}. \quad (12)$$

Для первого уровня мы сравнивали наши расчеты не только с приближением бесконечной ямы, но и с квадратичным сдвигом Штарка в слабых полях, рассчитанным вариационным методом, предложенным в [5]. Соответствующие кривые представлены на рис. 1 штрихпунктирными линиями.

Влияние электрического поля на ширину уровней Γ достаточно тривиально (рис. 2). С приближением n -го уровня к континууму возрастает их взаимодействие и увеличивается Γ . На этот процесс оказывает влияние наличие расположенных между n -м уровнем и континуумом квазисвязанных состояний. В результате при глубинах ямы $\tilde{\nu} \sim n^2$, когда n -е состояние становится верхним в квантовой яме, происходит резкое изменение крутизны рассматриваемой зависимости.

Влияние флуктуаций ширины квантовой ямы

Флуктуации толщины гетерослоя δL_z в плоскости (x, y) приводят к неоднородному уширению спектра таким образом, что даже при отсутствии поля вместо бесконечно узкого уровня одномерной идеальной квантовой ямы получаем резонанс, форма которого описывается контуром Гаусса. Величина соответствующего

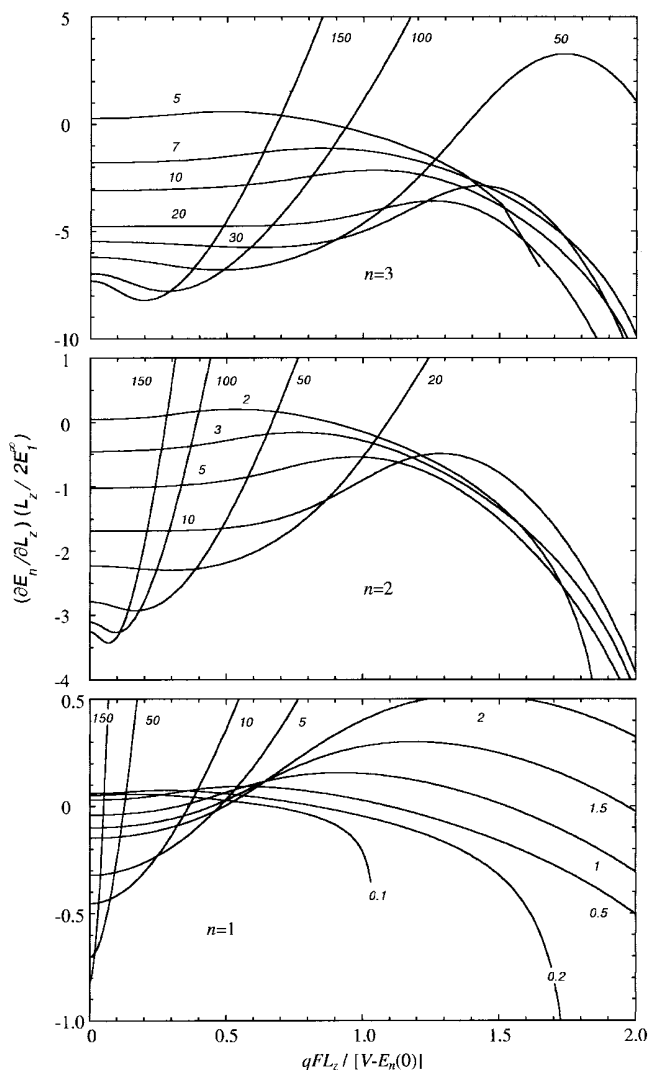


Рис. 3. Зависимость производной от положения уровня размерного квантования $n = 1, 2$ и 3 по ширине квантовой ямы от электрического поля. Указаны значения параметра безразмерной глубины ямы.

неоднородного уширения $(\Gamma_{\delta L_z})_n$ пропорциональна абсолютному значению производной от положения уровня размерного квантования по ширине ямы:

$$(\Gamma_{\delta L_z})_n = \left| \frac{\partial E_n}{\partial L_z} \right| \kappa_{\delta L_z} \delta L_z. \quad (13)$$

Коэффициент $\kappa_{\delta L_z}$ зависит от параметров флуктуаций (например, от характеристических размеров (L_x, L_y) островков, образующих шероховатость поверхности) и имеет порядок единицы.

В безразмерных единицах

$$\frac{\partial E_n}{\partial L_z} = \frac{\partial [\varepsilon_n(\tilde{v}) E_1^\infty]}{\partial L_z} = \frac{2E_1^\infty}{L_z} \left(\frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \tilde{v}} \tilde{v} - \varepsilon_n \right). \quad (14)$$

Полевая зависимость производной от положения энергетических уровней по ширине ямы имеет сложный

характер (рис. 3) и далеко не тривиальна. С одной стороны, увеличение ширины ямы увеличивает ее безразмерную глубину \tilde{v} , что в реальном масштабе может сопровождаться как поднятием лежащих близко к континууму уровней, так и понижением более глубоких. Этот механизм целиком определяет производную в нулевом поле. Она изменяется от небольших положительных величин для ям глубиной $\tilde{v} \sim (n-1)^2$ до $-n^2$ для ямы бесконечной глубины. С другой стороны, в электрическом поле образуется треугольный барьер, сквозь который происходит туннелирование носителей. При одном и том же $F \neq 0$ и фиксированной энергии вероятность туннелирования тем больше, чем шире яма. Это приводит к понижению высоколежащих уровней. С увеличением поля возрастает наклон потенциала и происходит постепенное слияние верхних состояний с континуумом, что сопровождается усилением влияния на n -й уровень второго механизма. Поскольку безразмерная глубина ямы пропорциональна $(L_z)^2$, производная от положения энергетических уровней по ширине ямы при $n \geq 2$ несколько уменьшается в слабых полях (11). Затем она увеличивается, может перейти через нуль и расти дальше. Отметим, что наличие экстремумов в зависимостях $(\partial E_n / \partial L_z)$ от поля может соответствовать как максимуму, так и минимуму уширения в зависимости от того, изменила ли знак производная. Дальнейший рост поля сопровождается увеличением отрицательного значения производной, т.е. ростом соответствующего уширения вплоть до слияния с континуумом.

Влияние флуктуаций потенциала (глубины квантовой ямы)

Аналогично тому, как это было проделано выше, рассмотрим влияние на спектр флуктуаций потенциала. Часто считают, что ими можно пренебречь, если материалом квантовой ямы является бинарное соединение, например, GaAs или InP, а не твердый раствор. Это не совсем справедливо. Если барьеры изготовлены из твердого раствора, то флуктуации его состава также приведут к флуктуациям глубины квантовой ямы. В качестве флуктуирующего параметра целесообразно использовать разрыв ширины запрещенной зоны материала барьеров и ямы (ΔE_g) , считая, что глубина ямы $V(z)$ пропорциональна этой величине. Тогда аналогично (13)

$$(\Gamma_{\delta \Delta E_g})_n = \left| \frac{\partial E_n}{\partial \Delta E_g} \right| \kappa_{\delta \Delta E_g} \delta \Delta E_g, \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_n}{\partial \Delta E_g} &= \frac{\partial (\varepsilon_n E_1^\infty)}{\partial [\tilde{v} (\Delta E_g / V) E_1^\infty]} \\ &= \frac{V}{\Delta E_g} \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \tilde{v}} = \frac{E_1^\infty}{\Delta E_g} \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \tilde{v}}. \end{aligned} \quad (16)$$

В нулевом поле производная по разрыву ширины запрещенной зоны положительна (рис. 4). Это отражает

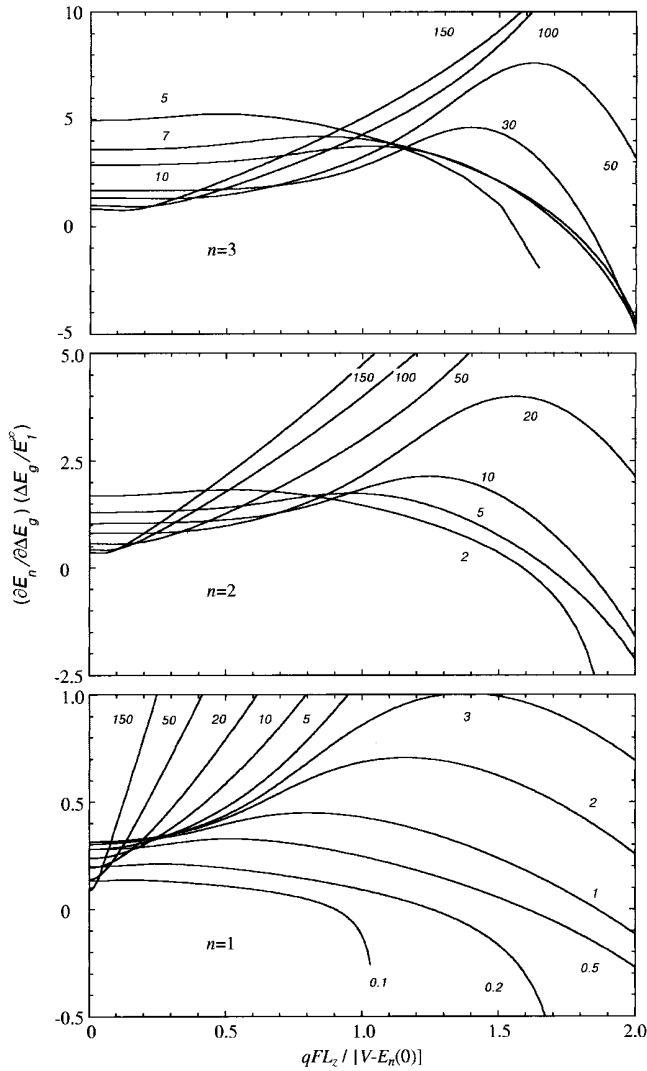


Рис. 4. Зависимость производной от положения уровня размерного квантования $n = 1, 2$ и 3 по разрыву ширины запрещенной зоны от электрического поля. Указаны значения параметра безразмерной глубины ямы.

тот факт, что с увеличением глубины ямы уровни поднимаются, стремясь к своим значениям в бесконечной яме (рис. 1). При одинаковой глубине ямы это проявляется сильнее для уровней с большими n , что отвечает большему значению производной. Интересно, что для уровней с $n \geq 2$ при $F = 0$ с ростом \tilde{v} производная уменьшается в соответствии с ослаблением их чувствительности к флуктуациям глубины. Для нижнего уровня она сначала растет, достигает наибольшего значения при $\tilde{v} = 1$, когда впервые появляются вышележащие уровни, а затем начинает уменьшаться, стремясь к нулю для бесконечной ямы. Производная от положения энергетического уровня по разрыву ширины запрещенной зоны как функция поля имеет три характерных участка. На начальном участке она остается практически постоянной. Рост поля сопровождается все большим взаимодействием с континуумом, в результате все уровни опускаются тем сильнее,

чем больше верхних уровней дают на него (рис. 1). Производная по глубине ямы увеличивается (рис. 4). При дальнейшем росте поля верхние уровни постепенно сливаются с континуумом, ослабляя давление на нижние. Процесс сопровождается перегибом на зависимости положения уровней от поля (рис. 1). Точке перегиба отвечает максимум рассматриваемой производной (рис. 4), соответствующий максимуму уширения.

Спектр неидеальной квантовой ямы GaAs/(Al,Ga)As

Для иллюстрации возможностей предлагаемой методики проследим влияние электрического поля на энергетический спектр электронов в квантовой яме GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As со следующими параметрами: $V = 224.5$ мэВ, $L_z = 12$ нм, $m^* = 0.08m_0$. Им соответствуют $E_1^\infty = 33.1$ мэВ и $\tilde{v} = 6.78$.

Спектральная линия в общем виде описывается сверткой контура Гаусса $G(E)$ шириной $\Gamma_n^{inh} = \sqrt{\Gamma_{\delta\Delta E_g}^2 + \Gamma_{\delta L_z}^2}$ и функцией (2), учитывающей однородное уширение за счет туннелирования носителей через образующийся в электрическом поле треугольный барьер Γ_n^{hom} :

$$g_n(E) = L_n(E)G_n(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} L_n(E', \Gamma_n^{hom})G_n(E - E', \Gamma_n^{inh})dE'.$$

Заметим, что в экспериментах, измеряющих конкретные эффекты, необходимо также учитывать не зависящее от

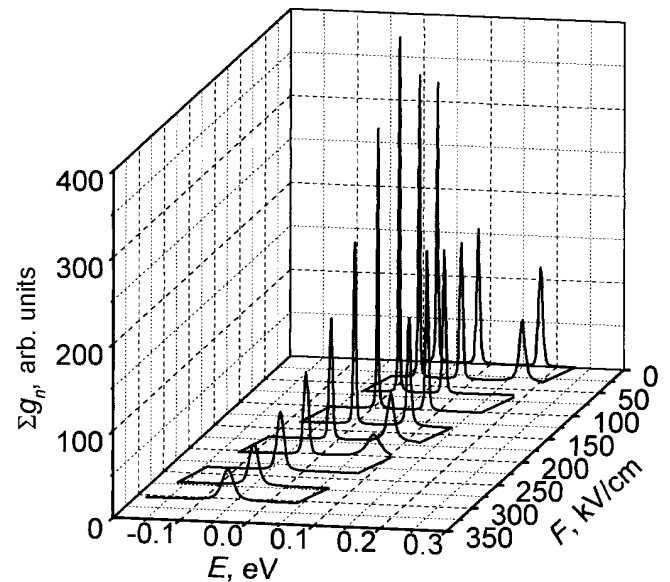


Рис. 5. Влияние электрического поля на энергетический спектр электронов в неидеальной квантовой яме GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As с учетом полевого уширения, уширения за счет макроскопических флуктуаций состава $\delta\Delta E_g/\Delta E_g = 5\%$ и неоднородности толщины слоя $\delta L_z/L_z = 5\%$ при $L_z = 12$ нм.

поля однородное уширение линий за счет взаимодействия с фононами.

На рис. 5 приведены рассчитанные спектры (Σg_n) с учетом рассмотренных механизмов уширения при макроскопических флуктуациях состава $\delta\Delta E_g/\Delta E_g = 5\%$ и неоднородности толщины слоя квантовой ямы $\delta L_z/L_z = 5\%$. Для определенности при расчете учитывалось постоянное температурное уширение $\Gamma_T = 1.47$ мэВ. Энергетический спектр квантовой ямы оказался гораздо чувствительнее к флуктуациям толщины слоя, чем к флуктуациям состава твердого раствора. Действие последнего механизма вообще ощущается только в слабых полях. Это связано с тем, что производная по разрыву ширины запрещенной зоны (рис. 4) начинает уменьшаться примерно тогда же, когда существенно возрастает полевое уширение (рис. 2). В результате спектр изменяется относительно монотонно. Влияние флуктуаций ширины запрещенной зоны тем больше, чем выше расположены уровни и сильнее поле. Совершенно по-иному воздействуют на спектр флуктуации ширины ямы. Во-первых, в нулевом поле при одинаковых относительных величинах флуктуаций уширение за счет неоднородности толщины гетерослоя существенно превышает уширение за счет неоднородности состава твердого раствора. Во-вторых, минимумы уширения, связанные с соответствующим поведением $\partial E_n/\partial L_z$ (рис. 3), проявляются в диапазоне полей, когда туннелирование сквозь треугольный барьер мало.

В заключение отметим, что предложенные на рис. 1–4 семейства безразмерных зависимостей применимы для построения спектров одиночных квантовых ям с произвольными параметрами и могут быть использованы при анализе конкретных экспериментальных данных. Обнаруженные различия во влиянии флуктуаций толщины и глубины квантовой ямы на ее энергетический спектр в электрическом поле могут позволить, с одной стороны, установить причины неоднородного уширения наблюдаемых спектров, а с другой — оценить величину внутреннего электрического поля в реальных структурах.

Список литературы

- [1] А.Н. Пихтин. ФТП, **11**, 425 (1977).
- [2] С.Д. Барановский, А.Л. Эфрос. ФТП, **12**, 2233 (1978).
- [3] М. Рид, Б. Саймон. *Методы современной математической физики* (М., Мир, 1982) т. 4, гл. XII, с. 66.
- [4] E.L. Ivchenko, G.E. Pikus. *Superlattices and Other Heterostructures. Symmetry and Optical Phenomena*, ed. by M. Cardona (Springer Verlag Berlin Heidelberg 1995, 1997) ch. 3. p. 96.
- [5] G. Bastard, E.E. Mendez, L.L. Chang, L. Esaki. Phys. Rev. B, **28**, 3241 (1983).

Редактор Л.В. Шаронова

Energy spectrum of imperfect quantum well in an electric field

O.L. Lazarenkova, A.N. Pikhtin

St.Petersburg Electrotechnical University
197376 St.Petersburg, Russia

Abstract The effect of electric field on the energy spectrum of quantum well with macroscopic fluctuations has been considered. Both the Stark shift of quantum well quasi-bound states and three field-dependent broadening mechanisms (i.e. the field-induced homogeneous broadening, the broadening caused by well width fluctuations, and the broadening caused by well depth fluctuations) have been calculated in the wide range of the electric field. The electron energy spectra of a 12 nm GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As quantum well with width and depth 5% fluctuations as a function of electric field are presented as an example.

Fax: (812)2343164

E-mail: pikhtin@fvleff.etu.spb.ru