

01.1;08.3

Применение метода матрицы рассеяния для расчета примесных состояний в полупроводниковых структурах

© С.В. Морозов^{1,2}, М.С. Жолудев^{1,2}¹ Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия² Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

E-mail: more@ipmras.ru

Поступило в Редакцию 18 декабря 2020 г.

В окончательной редакции 18 декабря 2020 г.

Принято к публикации 21 декабря 2020 г.

Метод матрицы рассеяния адаптирован для расчета уровней энергии и волновых функций носителей заряда вблизи примесно-дефектных центров. Возможность применения данного метода для многозонных моделей продемонстрирована на примере гамильтониана Латтинжера с кулоновским акцептором в приближении сферической симметрии. Полученные значения энергии дискретных уровней хорошо согласуются с результатами расчетов, выполненных другими методами.

Ключевые слова: HgCdTe, примесь, узкозонные полупроводники, матрица рассеяния.

DOI: 10.21883/PJTF.2021.07.50795.18663

Значительные успехи в получении длинноволнового стимулированного излучения в узкозонных гетероструктурах с квантовыми ямами $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$ [1] делают актуальными задачи создания p - n -перехода и изучения влияния примесей на процессы безызлучательной рекомбинации в образцах такого типа. Это в свою очередь требует развития методов численного моделирования примесных состояний в узкозонных полупроводниках, особенностью изучения которых является необходимость учитывать большое количество близких по энергии зон при теоретических расчетах. Вследствие этого при численном решении уравнения Шредингера возникает сильная неустойчивость, связанная с экспоненциально растущими решениями, которая проявляется не только в запрещенной зоне, но и в области непрерывного спектра (см., например, работу [2]). Здесь представляется перспективным применение метода матрицы рассеяния [3–6], который обладает высокой численной устойчивостью. Ранее в системах с плавным потенциалом такой метод использовался только для задач с одним уравнением, что применительно к полупроводникам соответствует приближению эффективной массы. В настоящей работе мы предлагаем обобщение данного подхода для многозонного приближения. В качестве примера применения обобщенного метода рассмотрим модель Латтинжера с кулоновским акцептором в приближении сферической симметрии [7].

В рамках приближения огибающих функций [8] с учетом сферической симметрии [2,7,9,10] волновая функция электрона записывается следующим образом:

$$\Psi_{\lambda}^{(J,M)}(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{n_f} f_{\lambda,n}^{(J)}(r) \Phi_{\lambda,n}^{(J,M)}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где $\Phi_{\lambda,n}^{(J,M)}(\mathbf{r})$ — собственные функции оператора квадрата полного углового момента (собственное значение J)

и его проекции на ось z (собственное значение M), которые включают в себя угловую зависимость и базис Кона–Латтинжера. Индекс λ содержит все остальные квантовые числа, набор которых, как и конкретный вид функций $\Phi_{\lambda,n}^{(J,M)}(\mathbf{r})$, зависит от рассматриваемой модели. Таким образом, волновая функция вида (1) определяется вектором функций $\mathbf{f}_{\lambda}^{(J)}(r)$ размерности n_f , который удовлетворяет уравнению Шредингера с матричным гамильтонианом

$$[\hat{\mathbf{H}}_0(J, \lambda) + V(r)]\mathbf{f} = E\mathbf{f}, \quad (2)$$

где $\hat{\mathbf{H}}_0(J, \lambda)$ — гамильтониан электрона в однородном полупроводнике, а $V(r)$ — потенциал примеси. Далее для наглядности опустим параметры J и λ .

Применение метода матрицы рассеяния для решения уравнения (2) вблизи $r = 0$ в общем случае не представляется возможным, поскольку в этой точке потенциал примеси, как правило, имеет особенность. Выберем близкую к нулю точку r_0 , такую, что при $r \leq r_0$ неустойчивость не мешает получить решение уравнения (2) методом Рунге–Кутты. Выберем также точку r_N , достаточно далекую от нуля, чтобы при $r \geq r_N$ мы могли считать потенциал примеси равным нулю. В области $[r_0, r_N]$ будем искать решение уравнения (2) с помощью метода матрицы рассеяния. Для этого разобьем ее на отрезки серией точек r_0, r_1, \dots, r_N . На каждом отрезке $[r_j, r_{j+1}]$ будем считать потенциал постоянным и равным $V_j = [V(r_j) + V(r_{j+1})]/2$. Тогда уравнение (2) примет вид

$$\hat{\mathbf{H}}_0 \mathbf{f}_j = (E - V_j) \mathbf{f}_j. \quad (3)$$

Выражение (3) представляет собой систему из n_f уравнений второго порядка, которая имеет $2n_f$ частных решений, представляющих собой наборы сфериче-

ских волн

$$\mathbf{f}_{j,n}^{(a,b)}(r) = \begin{pmatrix} c_{j,n,1} S_{L_1, \pm k_{j,n}}(r) \\ \vdots \\ c_{j,n,n_f} S_{L_{n_f}, \pm k_{j,n}}(r) \end{pmatrix}, \quad n = 1, \dots, n_f, \quad (4)$$

где $s_{L,k}(r) = j_L(kr) + iy_L(kr)$, а j_L и y_L — сферические функции Бесселя первого и второго рода соответственно. Отметим, что эти функции определены как для вещественных, так и для мнимых значений $k_{j,n}$ (см., например, [11]). Мы можем считать, что в выражении (4) $k_{j,n}$ является положительным вещественным числом либо мнимым числом с положительной мнимой частью. Тогда функции $\mathbf{f}_{j,n}^{(a)}(r)$ будут сферическими волнами, бегущими от центра (для вещественных $k_{j,n}$), либо экспоненциально затухающими решениями (для мнимых $k_{j,n}$). В этом случае функции $\mathbf{f}_{j,n}^{(b)}(r)$, имеющие противоположный знак волнового числа, будут соответственно сферическими волнами, бегущими к центру, либо экспоненциально растущими решениями. Такая классификация решений обеспечивает устойчивость метода матрицы рассеяния [3]. Значения волнового числа $k_{j,n}$ и коэффициенты $c_{j,n,i}$ получаются путем подстановки выражения (4) в уравнение (3).

Приближенное решение уравнения (2) на отрезке $[r_j, r_{j+1}]$ будет линейной комбинацией всех частных решений (4):

$$\mathbf{f}_j(r) \simeq \mathbf{F}_j^{(a)}(r) \mathbf{a}_j + \mathbf{F}_j^{(b)}(r) \mathbf{b}_j,$$

где матрицы $\mathbf{F}_j^{(a,b)}(r)$ составлены из столбцов вида (4):

$$\mathbf{F}_j^{(a,b)}(r) = (\mathbf{f}_{j,1}^{(a,b)}(r), \dots, \mathbf{f}_{j,n_f}^{(a,b)}(r)),$$

а неизвестные векторы \mathbf{a}_j и \mathbf{b}_j должны обеспечить непрерывность и гладкость функции $\mathbf{f}_j(r)$ на границах отрезков. Следуя процедуре, подробно описанной в работе [3], получим набор матриц рассеяния, удовлетворяющих следующему выражению:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_{j_2} \\ \mathbf{b}_{j_1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{j_1, j_2}^{(aa)} & \mathbf{S}_{j_1, j_2}^{(ab)} \\ \mathbf{S}_{j_1, j_2}^{(ba)} & \mathbf{S}_{j_1, j_2}^{(bb)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_{j_1} \\ \mathbf{b}_{j_2} \end{pmatrix}, \quad j_1 < j_2. \quad (5)$$

Чтобы использовать это выражение для вычисления векторов \mathbf{a}_j и \mathbf{b}_j , нужно знать значения \mathbf{a}_0 и \mathbf{b}_N (см. [3]).

Из условия конечности волновой функции при $r \rightarrow \infty$ следует, что все компоненты вектора \mathbf{b}_N , соответствующие экспоненциальным решениям, должны быть равны нулю. В области непрерывного спектра оставшиеся ненулевые компоненты \mathbf{b}_N вычисляются из условий нормировки и ортогональности волновых функций. В области дискретного спектра имеем $\mathbf{b}_N = 0$. Таким образом, мы можем считать вектор \mathbf{b}_N .

Для вычисления вектора \mathbf{a}_0 аналогично работе [2] с помощью обобщенного метода Фробениуса [12] и метода Рунге–Кутты в области $r \leq r_0$ найдем n_f линейно

независимых решений уравнения (2), которые не имеют особенности в точке $r = 0$ и образуют матрицу $\mathbf{F}_{-1}^{(a)}(r)$ (мы используем индекс -1 , поскольку эти решения находятся левее отрезка с индексом 0). Из условия непрерывности и гладкости решения в точке r_0 получим следующее выражение:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_0 \\ \mathbf{b}_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{T}^{(a)} \\ \mathbf{T}^{(b)} \end{pmatrix} \mathbf{a}_{-1}, \quad (6)$$

где

$$\begin{pmatrix} \mathbf{T}^{(a)} \\ \mathbf{T}^{(b)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_0^{(a)}(r_0) & \mathbf{F}_0^{(b)}(r_0) \\ \mathbf{F}_0^{\prime(a)}(r_0) & \mathbf{F}_0^{\prime(b)}(r_0) \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{-1}^{(a)}(r_0) \\ \mathbf{F}_{-1}^{\prime(a)}(r_0) \end{pmatrix}.$$

Подставив в формулу (5) значения $j_1 = 0$, $j_2 = N$ и выражение (6) для \mathbf{a}_0 и \mathbf{b}_0 , получаем следующее уравнение:

$$\mathbf{Q} \mathbf{a}_{-1} = \mathbf{S}_{0,N}^{(bb)} \mathbf{b}_N,$$

где

$$\mathbf{Q} = \mathbf{T}^{(b)} - \mathbf{S}_{0,N}^{(ba)} \mathbf{T}^{(a)}.$$

Поскольку для локализованных состояний $\mathbf{b}_N = 0$, условием для энергии уровней дискретного спектра будет

$$\det \mathbf{Q}(E) = 0. \quad (7)$$

В качестве примеров применения данного метода рассмотрим две системы, решения для которых были найдены другими способами: водородоподобный центр и кулоновский акцептор в сферически-симметричной модели Латтинжера [7].

Для водородоподобного центра выражение для волновой функции электрона (1) выглядит следующим образом:

$$\Psi_L^{(J,M)}(\mathbf{r}) = f_L^{(J)}(r) \Phi_L^{(J,M)}(\mathbf{r}),$$

где $L = J \pm 1/2$. Размерность решения равна единице ($n_f = 1$), а гамильтониан однородного полупроводника и потенциал в уравнении (2) равны

$$\hat{\mathbf{H}}_0(J, L) = -\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{L(L+1)}{r^2},$$

$$V(r) = -\frac{2}{r},$$

где в качестве единиц измерения длины и энергии выбраны соответственно боровский радиус ($a_0 = \hbar^2/me^2$) и ридберг ($E_0 = me^4/2\hbar^2$). Точное решение этой задачи известно, и значения энергии дискретных уровней равны [6]:

$$E_{L,n} = \frac{1}{(n+L)^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Эти энергии, так же как результаты расчетов функции $\det \mathbf{Q}(E)$ в уравнении (7), приведены на рис. 1, из которого хорошо видно, что действительная и мнимая части $\det \mathbf{Q}(E)$ одновременно обращаются в нуль именно на уровнях дискретного спектра. Отметим, что мы

получили тот же результат, что и в работе [6]. При этом вместо плоских волн мы использовали сферические волны, что позволило обойтись без замены искомой функции в уравнении (2) и не включать в потенциал слагаемые, зависящие от L .

Теперь рассмотрим кулоновский акцептор в сферически-симметричной модели Латтинжера [7]. По аналогии с работами [2,7,10] мы можем представить волновую функцию электрона в такой системе в виде

$$\Psi_L^{(J,M)}(\mathbf{r}) = f_{L+1}^{(J)}(r)\phi_{L+1,3/2}^{(J,M)}(\mathbf{r}) + f_{L-1}^{(J)}(r)\phi_{L-1,3/2}^{(J,M)}(\mathbf{r}), \quad (8)$$

где $L = J \pm 1/2$, а $\phi_{L,3/2}^{(J,M)}$ — собственные функции оператора квадрата полного углового момента и его проекции на ось z (собственные числа J и M), полученные из состояний с орбитальным моментом L и спином $3/2$. Размерность решения равна двум ($n_f = 2$), а гамильтониан однородного полупроводника и потенциал будут теми же, что и в работе [7].

В зависимости от минимального значения орбитального момента в формуле (8) состояния акцептора делятся на уровни S -типа, P -типа и т.д. [7]. Отметим, что в случае $J = 1/2$ в выражении (8) сохраняется только первое слагаемое, и мы получаем два одномерных двукратно вырожденных решения P - и D -типа.

На рис. 2 приведены полученные различными методами зависимости энергий дискретных уровней S - и P -типа от параметра μ , который определяет отношение масс легких и тяжелых дырок [7]: $m_{lh}/m_{hh} = (1 - \mu)/(1 + \mu)$. В настоящей работе результаты были получены путем решения уравнения (7), а в работе [7] — с помощью вариационного метода. Хорошо видно, что результаты

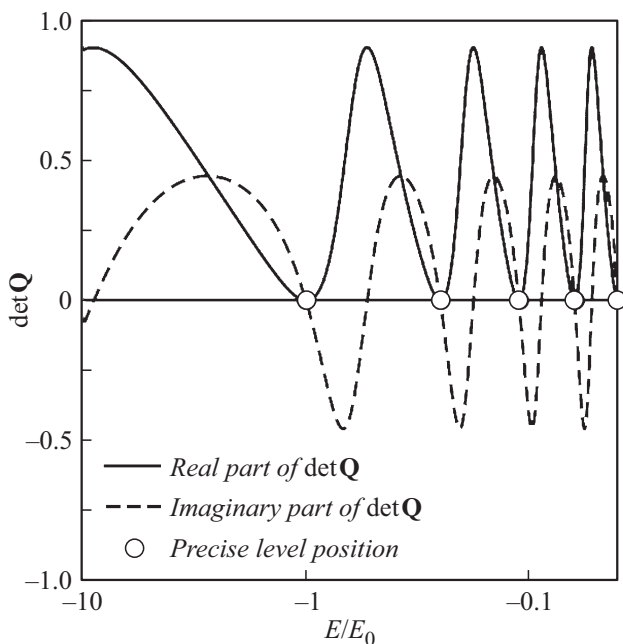


Рис. 1. Рассчитанная зависимость величины $\det Q$ от энергии в области дискретного спектра водородоподобного центра при $L = 0$. Масштаб по оси энергий логарифмический.

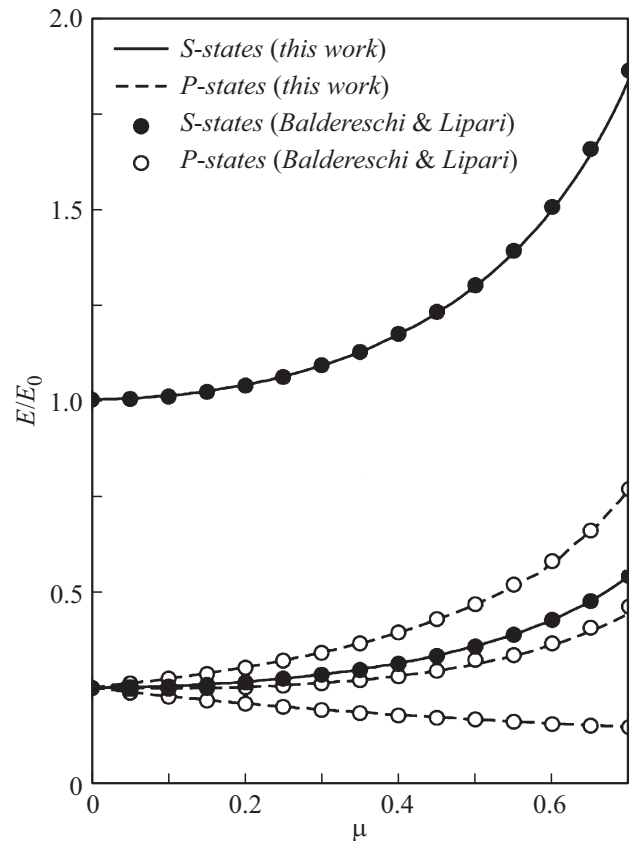


Рис. 2. Результаты расчетов зависимости энергий дискретных уровней кулоновского акцептора от параметра μ .

расчетов дискретного спектра, полученные разными способами, практически совпадают.

Метод матрицы рассеяния уже достаточно давно применяется для решения задач как со ступенчатым, так и с плавно меняющимся потенциалом. Он хорошо зарекомендовал себя благодаря своей численной устойчивости. В настоящей работе мы провели обобщение этого метода на случай систем дифференциальных уравнений произвольной размерности. Применение обобщенного метода к задаче об акцепторе в сферически-симметричной модели Латтинжера продемонстрировало хорошее согласие с полученными ранее теоретическими результатами. Аналогичный подход может использоваться для изучения локализованных и резонансных примесных состояний в полупроводниковых структурах на основе узкозонных и бесщелевых материалов (включая соединения $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$).

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (грант № 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024)).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] S. Morozov, V. Romyantsev, M. Fadeev, M. Zholudev, K. Kudryavtsev, A. Antonov, A. Kadykov, A. Dubinov, N. Mikhailov, S. Dvoretiskii, V. Gavrilenko, *Appl. Phys. Lett.*, **111**, 192101 (2017). DOI: 10.1063/1.4996966
- [2] М.С. Жолудев, Д.В. Козлов, Н.С. Куликов, А.А. Разова, В.И. Гавриленко, С.В. Морозов, *ФТП*, **54** (8), 695 (2020). DOI: 10.21883/FTP.2020.08.49652.9404
- [3] D.Y.K. Ko, J.C. Inkson, *Phys. Rev. B*, **38**, 9945 (1988). DOI: 10.1103/PhysRevB.38.9945
- [4] M.S. De Bianchi, M.D. Ventra, *Eur. J. Phys.*, **16**, 260 (1995). DOI: 10.1088/0143-0807/16/6/003
- [5] C. Ramirez, R. Leon, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **86**, 114002 (2017). DOI: 10.7566/JPSJ.86.114002
- [6] C. Ramirez, F.H. Gonzalez, C.G. Galvan, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **88**, 094002 (2019). DOI: 10.7566/JPSJ.88.094002
- [7] A. Baldereschi, N.O. Lipari, *Phys. Rev. B*, **8**, 2697 (1973). DOI: 10.1103/PhysRevB.8.2697
- [8] J.M. Luttinger, W. Kohn, *Phys. Rev.*, **97**, 869 (1955). DOI: 10.1103/PhysRev.97.869
- [9] Д.А. Варшалович, А.Н. Москалев, В.К. Херсонский, *Квантовая теория углового момента* (Наука, Л., 1975).
- [10] E.P. Pokatilov, V.A. Fonoberov, V.M. Fomin, J.T. Devreese, *Phys. Rev. B*, **64**, 245328 (2001). DOI: 10.1103/PhysRevB.64.245328
- [11] М. Абрамовиц, И. Стиган, *Справочник по специальным функциям* (Наука, М., 1979).
- [12] M. Barkatou, T. Cluzeau, C. El Vacha, in *Proc. of mathematical theory of networks and systems* (Budapest, Hungary, 2010), p. 1059.