

Энергетическая структура A^+ -центров в квантовых ямах

© Н.С. Аверкиев, А.Е. Жуков, Ю.Л. Иванов, П.В. Петров, К.С. Романов[¶],
А.А. Тонких, В.М. Устинов, Г.Э. Цырлин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 18 июня 2003 г. Принята к печати 30 июня 2003 г.)

Рассмотрены состояния дырки, локализованной на акцепторе в квантовой яме, в модели потенциала нулевого радиуса. Аналитически получено дисперсионное уравнение дырки с учетом сложной валентной зоны с симметрией Γ_8 . Проведено сравнение с экспериментальными данными по зависимости энергии связи дырки на A^+ -центре от ширины квантовой ямы и продемонстрировано хорошее согласие с теоретическими расчетами.

1. Введение

Свойства квантовых структур, содержащих примеси, интенсивно изучаются не только ввиду прикладных аспектов, но и вследствие новой физической ситуации. Действительно, на электрон или дырку, локализованные на дефекте, находящемся в квантовой яме, действует потенциал примеси и структуры, причем последний, уменьшая область локализации носителя, вызывает увеличение его кинетической энергии и делокализацию в плоскости ямы. Потенциал примеси также может иметь несколько составляющих, и обычно в первую очередь говорят о кулоновской части потенциала (для заряженных центров) и короткодействующей части, происходящей из-за несоответствия атома примеси атому решетки. В связи с этим задача определения энергии связи и волновых функций носителя, связанного на дефекте в квантовой яме, становится весьма громоздкой и зависящей от химической природы дефекта. Получение информации о зависимости энергии связи носителя от параметров ямы и типа дефекта позволяет в принципе производить идентификацию примесей, а для этого необходимо иметь теоретические и экспериментальные зависимости энергии связи дефектов от параметров гетероструктуры.

В работах [1–3] экспериментально изучалась энергия связи и характерный размер волновой функции A^+ -центров в квантовых ямах различной ширины. В работах [4–6] теоретически исследовался мелкий кулоновский акцептор в прямоугольных квантовых ямах и были численно рассчитаны энергии связи дырки для конкретных структур.

Цель данной работы состоит в вычислении спектра акцептора или A^+ -центра, помещенного в квантовую яму, в рамках метода потенциала нулевого радиуса. Этот метод позволяет получить аналитические выражения для энергии связи и волновых функций. Будет выполнено сравнение результатов расчетов с экспериментами [1,2] и продемонстрировано их согласие.

2. Теория

Учет потенциала дефекта в рамках метода потенциала нулевого радиуса производится с помощью модификации уравнения Шрёдингера для свободной частицы. А именно, находятся решения уравнения Шрёдингера без притягивающего потенциала, убывающие на бесконечности. Роль притягивающего потенциала сводится к граничному условию, которое определяет асимптотическое поведение сферически симметричной части волновой функции вблизи дефекта [7]:

$$\bar{\psi}|_{r \rightarrow 0} = C \left(\frac{1}{r} - \alpha \right) + o(r), \quad (1)$$

где $\bar{\psi}$ — усредненная по углам волновая функция, а α — коэффициент, характеризующий короткодействующий потенциал.

В объемном случае, когда валентная зона полупроводника имеет симметрию Γ_8 , волновая функция основного состояния дырки, связанной на потенциале нулевого радиуса, тоже имеет симметрию Γ_8 . При этом ее можно разделить на сферически-симметричную часть и часть, содержащую сферические гармоники 2-го порядка; радиальная компонента несимметричной части при $r \rightarrow 0$ ведет себя как константа. Поэтому при исследовании состояний акцептора в кубических полупроводниках в граничное условие (1) нужно подставлять усредненную по углам волновую функцию ψ .

В то же время в объемном полупроводнике волновая функция основного состояния донора (в рамках метода потенциала нулевого радиуса) состоит только из сферически симметричной части и поэтому оказывается, что в граничном условии (1) можно использовать просто волновую функцию ψ , как сделано, например, в работе [8].

Коэффициент α зависит как от заряда дефекта, так и от его химических свойств и свойств материала квантовой ямы, являясь в рамках метода потенциала нулевого радиуса параметром задачи. В данной работе он определяется из наилучшего согласия положения уровня в объемном материале с экспериментальным значением и затем используется для вычисления положения уровня в квантовой яме.

[¶] E-mail: const@stella.ioffe.ru

Соответственно уравнение Шрёдингера в методе потенциала нулевого радиуса записывается в виде

$$H_0\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) + V\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\Psi_0,$$

где H_0 — гамильтониан Латтинжера, Ψ_0 — произвольный постоянный спинор, а \mathbf{r}_0 — положение примеси. В сферически-симметричном приближении

$$H_0 = \frac{1}{m_0} \left[\left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma \right) \frac{\hat{p}^2}{2} - \gamma(\hat{\mathbf{p}}\mathbf{J}) \right],$$

где γ , γ_1 — параметры Латтинжера, m_0 — масса свободного электрона, \mathbf{J} — матрицы момента $3/2$.

Вычисления удобно проводить в смешанном координатно-импульсном представлении. Введем систему координат, в которой оси OX и OY лежат в плоскости квантовой ямы, а ось OZ перпендикулярна ей. Для удобства расположим центр координатной системы посередине ямы. Тогда уравнение Шрёдингера в смешанном представлении будет иметь вид

$$H_0\psi(\mathbf{q}, z) = E\psi(\mathbf{q}, z) + V\delta(z - z_0)\Psi_0, \quad (2)$$

где q — двумерный волновой вектор в плоскости ямы, а z_0 — координата дефекта. Обсуждаемые эксперименты выполнены на образцах, в которых примесь находится в центре ямы, поэтому мы далее рассмотрим только случай $z = 0$.

Поскольку гамильтониан коммутирует с оператором обращения времени для нахождения волновой функции удобно воспользоваться методом Хопфилда. В рамках этого метода система 4-х уравнений (2) сводится к системе, состоящей уже из двух уравнений:

$$\begin{cases} (H_{11} - E)\psi_{\frac{3}{2}} + (H_{13} - H_{12}\frac{H_{43}}{H_{42}})\psi_{-\frac{1}{2}} = A\delta(z), \\ H_{31}\psi_{\frac{3}{2}} + (H_{33} - E)\psi_{-\frac{1}{2}} = C\delta(z), \end{cases} \quad (3)$$

где A и C — константы, являющиеся компонентами Ψ_0 ; $\psi_{\frac{3}{2}}$ и $\psi_{-\frac{1}{2}}$ — компоненты волновой функции, относящиеся к проекциям момента, равным $\frac{3}{2}$ и $-\frac{1}{2}$ соответственно, E отсчитывается от дна запрещенной зоны.

Волновая функция находится по отдельности в обеих областях, на которые делится квантовая яма плоскостью $z = 0$. Сшивка при $z = 0$ производится с помощью граничных условий, которые получаются посредством интегрирования уравнений системы (3) по координате z в интервале $(-0, +0)$. На границах ямы волновая функция дырки принимается равной 0, поскольку мы рассматриваем случай бесконечно глубокой ямы.

Вычисления показывают, что после усреднения по азимутальному углу волновая функция дырки будет иметь вид

$$\psi(q, z) = \begin{pmatrix} A\psi_{\frac{3}{2}}(q, z) \\ C\psi_{-\frac{1}{2}}(q, z) \end{pmatrix}. \quad (4)$$

$\psi_{\frac{3}{2}}$ и $\psi_{-\frac{1}{2}}$ выражаются формулами

$$\begin{cases} \psi_{\frac{3}{2}} = \text{sh}(\lambda_+(\frac{a}{2} - |z|)) (3\lambda_+^2 + \kappa_+^2)/(\lambda_+ \text{ch}(a\lambda_+/2)) \\ \quad + \text{sh}(\lambda_-(\frac{a}{2} - |z|)) (3\kappa_+^2 - 3\lambda_-^2)/(\lambda_- \text{ch}(a\lambda_-/2)), \\ \psi_{-\frac{1}{2}} = \text{sh}(\lambda_+(\frac{a}{2} - |z|)) (3\kappa_+^2 - 3\lambda_+^2)/(\lambda_+ \text{ch}(a\lambda_+/2)) \\ \quad + \text{sh}(\lambda_-(\frac{a}{2} - |z|)) (\kappa_-^2 + 3\lambda_-^2)/(\lambda_- \text{ch}(a\lambda_-/2)), \end{cases} \quad (5)$$

где a — ширина ямы, $\lambda_{\pm} = \sqrt{\kappa_{\pm}^2 + q^2}$, $\kappa_+ = \sqrt{-2Em_h}$, $\kappa_- = \sqrt{-2Em_l}$, а m_l и m_h — эффективные массы легких и тяжелых дырок соответственно. При $E < 0$ коэффициенты κ_{\pm} вещественны, а при $E > 0$ они становятся чисто мнимыми.

Для нахождения уровней энергии и коэффициентов A и C следует использовать граничное условие, описывающее потенциал (1). Поэтому компоненты $\psi_{\frac{3}{2}}$ и $\psi_{-\frac{1}{2}}$ нужно перевести в координатное представление и усреднить по полярному углу. Найти аналитические выражения для этих функций довольно трудно, но для определения уровней энергии требуется лишь знание асимптотического поведения этих функций при $r \rightarrow 0$. А именно, первых двух слагаемых в разложении по степеням r — коэффициентов при $\frac{1}{r}$ и 1. Параметр α в граничном условии (1) будет равен отношению этих коэффициентов, предварительно усредненных по азимутальному углу.

Для этого определяется наиглавнейшее слагаемое при $r \rightarrow 0$, а затем его фурье-образ вычитается из первоначальной функции и находится следующее слагаемое.

Видно, что сочетания $(A = 1, C = 0)$ и $(A = 0, C = 1)$ определяют собственные состояния системы. Двум волновым функциям соответствуют два значения энергии. Оказывается, что энергии двух состояний определяются из следующих уравнений:

$$\begin{aligned} \alpha &= \left(\kappa_+^2 \ln(2 \text{ch}(a\kappa_+/2)) + 3\kappa_-^2 \ln(2 \text{ch}(a\kappa_-/2)) \right. \\ &\quad \left. - a \frac{3}{2} \int_{\kappa_+}^{\kappa_-} \lambda^2 \text{th}(a\lambda/2) d\lambda \right) / (a(\kappa_+^2 + \kappa_-^2)), \\ \alpha &= \left(3\kappa_+^2 \ln(2 \text{ch}(a\kappa_+/2)) + \kappa_-^2 \ln(2 \text{ch}(a\kappa_-/2)) \right. \\ &\quad \left. + a \frac{3}{2} \int_{\kappa_+}^{\kappa_-} \lambda^2 \text{th}(a\lambda/2) d\lambda \right) / (a(\kappa_+^2 + \kappa_-^2)). \end{aligned}$$

Таким образом, нахождение положения уровня, связанного на дефекте состояния, заключается в нахождении коэффициента α исходя из энергии связи, в объемном случае с помощью формул (6) при $a \rightarrow \infty$, а затем в нахождении энергий по тем же самым формулам при конечных a . Необходимо также отметить, что в реальном эксперименте измеряется не энергия связи, а энергия перехода между локализованным уровнем и первым уровнем размерного квантования тяжелых дырок ($E_{hh} = \pi^2 \hbar^2 / (2m_h a^2)$).

3. Результаты экспериментов и обсуждение

Экспериментально исследовались образцы, выращенные на установке молекулярно-пучковой эпитаксии, селективно легированные бериллием с объемной концентрацией дырок в GaAs $1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

Каждый экспериментальный образец представлял собой набор из 10 квантовых ям GaAs, разделенных барьером 20 нм $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$. Ширина ям варьировалась от 7 до 18 нм. Для создания стационарных A^+ -центров в квантовых ямах был применен метод так называемого двойного селективного легирования, т.е. одновременно легировались и квантовые ямы, и барьеры. Такое расположение примеси приводит к заполнению акцепторов в ямах дырками с акцепторов в барьерах, т.е. к образованию A^+ -центров.

Спектры фотолюминесценции снимались с образцов погруженных непосредственно в жидкий гелий. Подведение света накачки от гелий-неонового лазера к образцу и съём люминесценции производились посредством стеклянного световода. Излучение регистрировалось с помощью дифракционного спектрометра и ФЭУ в режиме счета фотонов.

Возбужденные светом накачки неравновесные электроны и дырки, взаимодействуя с нейтральным акцептором, могут образовывать как связанные экситоны, так и A^+ -центры. На типичном спектре фотолюминесценции исследуемых структур [3] присутствуют пик, соответствующий излучению с A^+ -центра, и пик рекомбинации экситона, связанного на нейтральном акцепторе. Зависимости величин этих пиков от интенсивности света накачки являются линейными. Для разделения и установления точного положения пиков люминесценции полученные спектры сглаживались и аппроксимировались функциями Гаусса.

Идентификация этих пиков проводилась путем исследования температурной зависимости фотолюминесценции. Метод основан на том, что с повышением температуры пик связанного экситона быстро исчезает благодаря малой энергии связи экситона с нейтральным центром, тогда как интенсивность излучательных переходов свободный электрон- A^+ -центр уменьшается слабо. Значение энергии активации A^+ -центра определялось путем суммирования разницы энергии между пиками излучения A^+ и связанного экситона с энергией связи экситона на нейтральном акцепторе, известной из литературных данных.

На точность экспериментальных данных оказали влияние следующие факторы: зависимость энергии связи от положения примесного центра в яме, особенно сильная в узких ямах; отклонения параметров изготовленных структур от заданных; приборная погрешность. Наибольшей из погрешностей является та, которая связана с отклонением ширины полученной квантовой ямы от заданной величины. Оценка этой погрешности производилась перемножением производной энергии A^+ по

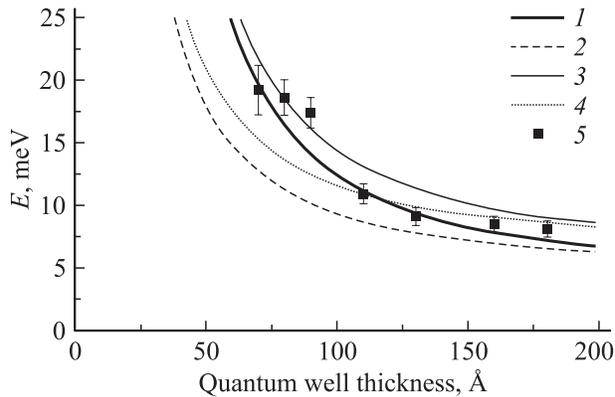


Рис. 1. Рассчитанные зависимости энергий связи основного (E_1) и возбужденного (E_2) состояния A^+ -центра от ширины ямы при энергиях связи дырки в объемных материалах, равных 5 и 7 мэВ. Детали эксперимента описаны в тексте. E_1 при энергии в объемном случае, мэВ: 1 — 5, 3 — 7; E_2 при энергии в объемном случае, мэВ: 2 — 5, 4 — 7, 5 — эксперимент.

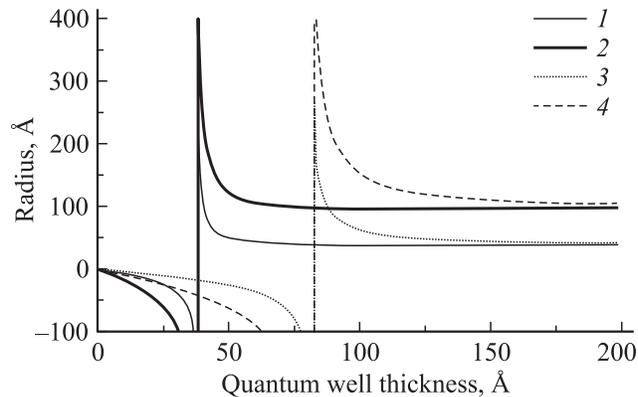


Рис. 2. Зависимости характерных размеров волновой функции A^+ -центра от ширины ямы для основного (1, 2) и возбужденного (3, 4) состояний при энергии связи в объеме, равной 5 мэВ. 1, 3 — $1/\chi_+$, 2, 4 — $1/\chi_-$.

размеру ямы на величину характерного отклонения размеров ямы. Суммарная погрешность отображена на рисунке.

На том же рисунке показаны рассчитанные с помощью (6) значения энергий ионизации дырки с основного и возбужденного уровней при различных значениях параметра α . В объемном материале параметр α связан с энергией связи соотношением

$$\alpha = \sqrt{-2E} \frac{(\gamma_1 + 2\gamma)^{-3/2} + (\gamma_1 - 2\gamma)^{-3/2}}{(\gamma_1 + 2\gamma)^{-1} + (\gamma_1 - 2\gamma)^{-1}},$$

где γ , γ_1 — параметры Латтинжера для материала.

На рис. 1 для примера взяты следующие значения: $E_1 = 5$ мэВ, $E_2 = 7$ мэВ. Видно, что результаты расчета хорошо согласуются с экспериментом. На рис. 2 показаны характерные размеры волновой функции дырки ($1/\chi_+$ и $1/\chi_-$) от ширины ямы для основного и возбужденного состояний, при энергии ионизации $E = 5$ мэВ.

Отрицательные κ_+ и κ_- при некоторых значениях ширины ямы означают то, что убывание волновой функции происходит степенным, а не экспоненциальным образом.

В работе [2] оценен размер A^+ , исходя из анализа прыжковой проводимости. Согласно нашим расчетам, в квантовых ямах [1,2] характерный размер волновой функции должен быть равен 100 \AA , что согласуется с [2], где эта величина равна 80 \AA .

Таким образом в данной работе продемонстрировано, что модель A^+ системы с потенциалом нулевого радиуса хорошо описывает эксперимент и дает возможность учесть химическую природу примеси.

Работа частично поддержана проектами РФФИ, INTAS, European Office of Aerospace Research and development, grant ISTC (МНТЦ) 2206, программами Министерства промышленности, науки и технологии РФ, программами Президиума РАН и ОФН РАН, фондом Содействия отечественной науке.

Список литературы

- [1] Ю.Л. Ива́нов, П.В. Петров, А.А. Тонких, Г.Э. Цырлин, В.М. Устинов. ФТП, **37**, 91 (2003).
- [2] Н.В. Агринская, Ю.Л. Ива́нов, В.М. Устинов, Д.А. Полоскин. ФТП, **35**, 571 (2000).
- [3] Ю.Л. Ива́нов, П.В. Петров, А.А. Тонких, Г.Э. Цырлин, В.М. Устинов. ФТП, **37**, 91 (2003).
- [4] W.T. Masselink, Y.-C. Chang, H. Morkoc. Phys. Rev. B, **28**, 7373 (1983).
- [5] В.И. Белявский, М.В. Гольдфарб, Ю.В. Копаев. ФТП, **31**, 1095 (1997).
- [6] В.Я. Алешкин, Б.А. Андреев, В.И. Гавриленко, И.В. Ерофеева, Д.В. Козлов, О.А. Кузнецов. ФТП, **34**, 582 (2000).
- [7] В.И. Перель, И.Н. Ясиевич. ЖЭТФ, **82**, 237 (1982).
- [8] А.А. Пахомов, К.В. Халипов, И.Н. Ясиевич. ФТП, **30**, 1387 (1996).

Редактор Л.В. Беляков

Energy structure of A^+ -centers in quantum wells

N.S. Averkiev, A.E. Zhukov, Yu.L. Ivanov, P.V. Petrov, K.S. Romanov, A.A. Tonkikh, V.M. Ustinov, G.E. Zyrlin

loffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract In the present article localized states of a hole bound on acceptor in quantum well are considered using zero radius potential method. The dispersion relation with the account of degenerated valence band has been obtained analytically. Comparison with experimental dependencies of A^+ the binding energy on the quantum well thickness has been made. Good agreement between experimental and theoretical data is shown.