

Резонансные состояния доноров в квантовых ямах

© Н.А. Бекин[†]

Институт физики микроструктур Российской академии наук,
603950 Нижний Новгород, Россия

(Получена 7 сентября 2004 г. Принята к печати 30 сентября 2004 г.)

Выполнены расчеты энергий и волновых функций резонансных состояний мелких доноров в квантовых ямах. Расчеты проводились в модели изолированного примесного центра на примере гетероструктуры GaAs/AlGaAs. Получена формула для вероятности спонтанного испускания полярных оптических (LO) фононов. Показано, что полярное электрон-фононное взаимодействие модифицируется вблизи энергий резонансов. Модификация обусловлена гибридизацией подзон размерного квантования, вследствие которой электрон взаимодействует с фононами, вообще говоря, одновременно в двух каналах (подзонах). Вычислено сечение поглощения инфракрасного излучения с учетом однородного (в среднем инфракрасном диапазоне) и неоднородного уширения (в дальнем инфракрасном диапазоне). Поглощение излучения, в котором электрическое поле волны перпендикулярно гетерограницам, обусловлено оптическими переходами в состояния в окрестности резонансов. Однородное уширение линий поглощения вместе с частотой рассеяния на LO -фононах оказываются зависящими от ширины резонансов (степени гибридизации подзон).

1. Введение

В селективно легированных полупроводниковых гетероструктурах имеются дополнительные возможности управления энергетическим спектром и свойствами примесных состояний, что представляет интерес как с фундаментальной, так и с прикладной точки зрения. В определенных участках непрерывного спектра происходит существенная перестройка состояний: под верхними подзонами размерного квантования [1,2], а также под $3D$ -континуумом [3] возникают резонансные (квазилокализованные) состояния примесных центров.

Резонансные состояния примесей в квантовых ямах проявлялись в экспериментах по рамановскому рассеянию [4], поглощению инфракрасного (ИК) излучения [5] и фотопроводимости [6]. Некоторые свойства резонансных состояний акцепторов [6] и доноров [1–3,7–13] теоретически исследовались в модели изолированных примесных центров. Для нахождения энергетического спектра и волновых функций использовался метод Дирака [8], вариационный метод [1,9,10] и метод разложения по волновым функциям электрона (дырки) в квантовой яме [3,6,8,11–13]. Были сделаны расчеты ширины резонансных уровней [1,3,7–10,12,13], коэффициента поглощения ИК-излучения [3,11–13], фотопроводимости [6], вероятности спонтанного испускания полярных оптических (LO) фононов [13].

В данной работе сделаны расчеты вероятности спонтанного испускания LO -фононов для энергий электронов в $2D$ -континууме на примере гетероструктур GaAs/AlGaAs. В отличие от работы [13], в которой соответствующие расчеты выполнены только для случая узких резонансов, в настоящей работе получена формула для вероятности испускания, применимая для резонансов произвольной ширины.

Резонансные состояния доноров должны проявляться в спектрах поглощения ИК-излучения, в котором электрическое поле волны перпендикулярно квантовым слоям [3,11–13]. Для гетероструктур $A^{III}B^V$ однородно уширенный контур линии поглощения излучения такой поляризации определяется темпом полярного рассеяния электронов с энергиями в окрестности резонансов. В настоящей работе вычислено сечение поглощения ИК-излучения с учетом этого механизма уширения.

Наличие потенциала примеси обуславливает снятие запрета на поглощение излучения, в котором электрическое поле волны направлено вдоль квантовых слоев в гетероструктурах n -типа. Поглощение излучения с такой поляризацией исследовалось в диапазоне, соответствующем оптическим переходам между локализованными состояниями доноров (например, в [17]) и примесно-зонным переходам [3]. Однако в [3] (для данной поляризации) не учитывалась модификация состояний $2D$ -континуума кулоновским потенциалом примеси и игнорировались механизмы уширения линий поглощения. В данной статье при вычислении сечения поглощения ИК-излучения принимались во внимание оба фактора. Для рассматриваемых здесь гетероструктур GaAs/AlGaAs поглощение излучения этой поляризации существенно только в дальнем ИК-диапазоне. Предполагалось, что механизм уширения для селективно легированных гетероструктур обусловлен зависимостью энергетического спектра примеси от ее положения в квантовой яме.

2. Спектр и волновые функции

2.1. Метод

Состояния мелких доноров хорошо описываются в приближении эффективной массы. Оператор Гамильтона без учета взаимодействия с ионом примеси запишем в

[†] E-mail: nbekin@ipm.sci-nnov.ru

следующем виде:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_\rho} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_z(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z), \quad (1)$$

где $m_z(z)$ и m_ρ — соответственно поперечная и продольная эффективные массы; для простоты полагаем m_ρ одинаковой в квантовой яме и барьерных областях. Решение уравнения Шредингера, содержащее кулоновский потенциал примеси, будем искать в виде разложения по собственным функциям невозмущенного гамильтониана H_0 .

Введем дискретизацию энергетического спектра, для чего наложим на волновые функции электрона нулевые граничные условия на боковой поверхности цилиндра радиуса R . Ось цилиндра совместим с осью z , проходящей через примесный центр перпендикулярно гетерограницам. Искомые физические величины найдем предельным переходом при $R \rightarrow \infty$. Дискретизация спектра позволяет, во-первых, избежать решения интегрального уравнения, во-вторых, естественным образом решить проблему расходимости диагональных матричных элементов базисных функций на кулоновском потенциале.

В полярных координатах ρ , φ и z волновую функцию стационарного состояния с определенным значением проекции L_z момента импульса на ось z можно записать в виде

$$|m, k, n\rangle \approx \sqrt{\frac{\pi k}{R}} J_m(k\rho) g_n(z) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad (2)$$

$J_m(k\rho)$ — функция Бесселя первого рода, $k^2 = 2m_\rho(E - E_n)/\hbar^2$ — волновое число продольного движения, E — собственное значение энергии, E_n — энергия минимума подзоны размерного квантования, $g_n(z)$ — нормированная волновая функция одномерного движения в потенциале $U(z)$, соответствующая уровню E_n . Выражение (2) является асимптотическим при $R \rightarrow \infty$. В нижеследующих выражениях при использовании асимптотик точные равенства будут заменяться приближенными.

Наложенные граничные условия дают следующий набор дискретных волновых чисел:

$$k_j R \approx \frac{\pi}{2} (m \pm 1) + \frac{\pi}{4} + \pi j, \quad (3)$$

j — целые числа. Из формулы (3) следует правило соответствия между интегрированием и суммированием по k :

$$\frac{R}{\pi} \int dk \leftrightarrow \sum_k. \quad (4)$$

Для корней (3) функции Бесселя удовлетворяют условию ортогональности:

$$\int_0^R J_m(k_l \rho) J_m(k_j \rho) \rho d\rho \approx \frac{R}{\pi k_j} \delta_{lj}, \quad (5)$$

где δ_{lj} — символ Кронекера.

Рассмотрим квазидвумерный случай, когда расстояние между подзонами размерного квантования (или расстояние от минимума нижней подзоны до границы 3D-континуума) значительно превышает энергию связи донора. Такая ситуация типична, например, для гетероструктур GaAs/AlGaAs. Кроме того, будем интересоваться энергиями электрона, достаточно далекими от 3D-континуума. Тогда можно пренебречь вкладом в волновую функцию состояний 3D-континуума, и представить ее в виде разложения:

$$|m, E\rangle = \sum_{n,j} C_n^{(m,E)}(k_j) |m, k_j, n\rangle, \quad (6)$$

где E — собственное значение энергии, $C_n^{(m,E)}(k_j)$ — коэффициенты разложения. В дальнейшем, как правило, будем опускать индексы m и E у величин, от которых они зависят. Выберем волновые функции $g_n(z)$ и коэффициенты C_n вещественными. Из ортонормированности базисных функций (2) следует условие нормировки для коэффициентов разложения:

$$\sum_{n,j} C_n^2(k_j) = 1.$$

После подстановки (6) в уравнение Шредингера получим систему из бесконечного числа линейных однородных уравнений:

$$C_n(k_j) \left(k_j^2 - \frac{2m_\rho}{\hbar^2} (E - E_n) \right) + \frac{2m_\rho}{\hbar^2} \sum_{l,s} V_{jl}^{ns} C_s(k_l) = 0, \quad (7)$$

где V_{jl}^{ns} — матричный элемент потенциала примеси на невозмущенных волновых функциях (2). Разлагая кулоновский потенциал донора в ряд Фурье–Бесселя на интервале $0 < \rho < R$, для V_{jl}^{ns} можно получить следующее выражение:

$$V_{jl}^{ns} \approx -\frac{\pi^2 e^2}{R^2 \epsilon} \sqrt{k_j k_l} \sum_p G_m(k_j, k_l, k_p, R) \times \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-|z - z_0| k_p) g_n(z) g_s(z) dz, \quad (8)$$

где k_p — корни (3) для $m = 0$, z_0 — координата z примесного центра, ϵ — диэлектрическая проницаемость, e — модуль заряда электрона,

$$G_m(k_j, k_l, k_p, R) = \int_0^R J_m(k_j \rho) J_m(k_l \rho) J_0(k_p \rho) \rho d\rho. \quad (9)$$

Для ускорения численных расчетов интеграл в (9) можно заменять пределом при $R \rightarrow \infty$ [14]. Исключением являются особые точки $k_p = |k_j - k_l|$ и $k_p = k_j + k_l$, в которых соответствующий предел не существует.

Для численного решения системы (7) ограничимся конечным числом уравнений, выбрав волновое число отсечки k_{\max} : $C_n(k_j) = 0$ при $k_j > k_{\max}$. Задача сведется к нахождению собственных значений ($E = E_\alpha$, $\alpha = 1, 2, \dots, N$) и собственных векторов ($C_n^{(\alpha)}(k_j)$, $j = 1, 2, \dots, K$, $n = 1, 2, \dots, L$, L — число подзон в квантовой яме, $N = LK$) конечной матрицы. Первоначальное значение k_{\max} следует выбрать много больше обратного радиуса Бора a_{3D} донора для объемного полупроводника. Радиус цилиндра R , очевидно, должен быть много большим a_{3D} . Увеличивая k_{\max} и R , процедура вычислений повторяется до ее сходимости и получения требуемой точности.

Использованный в данной работе подход не включает в рассмотрение некоторые важные факторы, имеющиеся в реальных гетероструктурах. В частности, игнорируется различие диэлектрических проницаемостей и продольных эффективных масс в квантовой яме и барьерных слоях. Учет этих факторов приводит, разумеется, к некоторым поправкам к энергиям локализованных и резонансных состояний доноров, однако качественно ситуация не изменяется [3,15]. Более существенными могут оказаться взаимное влияние примесных центров друг на друга и другие многочастичные эффекты, а также флуктуации состава и толщины квантовых слоев. В частности, для применимости модели изолированных примесных центров по меньшей мере необходимо, чтобы среднее расстояние между донорами существенно превышало радиус Бора донора, чего можно достичь, уменьшая концентрацию легирования. Последовательное рассмотрение упомянутых вопросов выходит за рамки данной работы.

2.2. Классификация состояний

В кулоновском потенциале стационарные состояния являются суперпозицией состояний с различными k и содержат вклады, вообще говоря, от всех подзон размерного квантования и $3D$ -континуума. Благодаря притягивающему характеру взаимодействия с примесным центром появляется дискретный спектр состояний, границей которого служит минимум нижней подзоны размерного квантования, а под возбужденными подзонами размерного квантования, а также под $3D$ -континуумом [3] возникает серия квазилокализованных (резонансных) состояний.

Для количественной характеристики состояний аналогично [3] введем величину $d_n(E, m)$, характеризующую степень принадлежности электрона с энергией E и квантовым числом m подзоне с номером n :

$$d_n(E, m) = \sum_j C_n^2(k_j). \quad (10)$$

Квазидвумерный электрон с энергией, достаточно далекой от $3D$ -континуума, может находиться в состоя-

ниях трех типов:

1. *Локализованные состояния*, имеющие вклады только от верхних подзон: для всех n выполняются неравенства $E_n > E$ и $d_n(E, m) \geq 0$.

2. *Делокализованные состояния*. Для номеров подзон n , для которых выполняется неравенство $E_n < E$, их суммарный вклад $\sum_n d_n(E, m)$ в формирование состояния порядка единицы.

3. *Гибридные состояния*. Для некоторой возбужденной n -й подзоны величина $d_n(E, m)$ порядка единицы, при этом минимум этой подзоны находится выше энергии рассматриваемого состояния ($E_n > E$). Суммарный вклад в это состояние от нижних подзон ($E_{n'} < E$, $n' < n$) сравним или много меньше $d_n(E, m)$. Гибридное состояние можно приписать вышеуказанной подзоне n , при этом величина $d_n(E, m)$ характеризует вероятность локализации электрона около примесного центра.

В квазидвумерном случае доминирующий вклад в формирование гибридного состояния дает одна или две подзоны, а для остальных двух типов состояний — только одна. Следует также заметить, что в присутствии кулоновского потенциала сохраняется дополнительное вырождение непрерывного спектра, начиная с энергий минимумов возбужденных подзон. (В невозмущенной квантовой яме аналогичное дополнительное вырождение возникает из-за наличия состояний с одной и той же энергией, но принадлежащих разным подзонам размерного квантования).

Электрон во всех трех типах состояний локализован в квантовой яме независимо от положения примесного центра. Ион донора фиксирует лишь положение области латеральной локализации в связанном или резонансном (в $2D$ -континууме) состоянии. В этом заключается специфика квазидвумерного случая, когда доминирующие силы, действующие на электрон в направлении z , связаны с гетеропотенциалом $U(z)$. Даже если примесный центр расположен далеко в барьерной области, принадлежащий ему электрон находится в квантовом слое. Из этого правила есть исключения для энергий электрона, близких к границе $3D$ -континуума: электрон в резонансных состояниях, принадлежащих $3D$ -континууму, может быть локализован на донорном центре [3], когда последний расположен в барьере. При этом остается конечная вероятность туннелирования электрона в квантовую яму.

Рассмотрим качественно характер зависимости коэффициентов разложения от волнового числа k . Локализованным состояниям соответствует широкая область импульсного пространства, в которой коэффициенты сравнительно велики. Наоборот, для делокализованного состояния, принадлежащего некоторой подзоне n ($d_n \approx 1$), зависимость коэффициента $C_n(k)$ от k резкая. Волновое число k_0 , в окрестности которого коэффициент $C_n(k)$ сравнительно велик, определяется уравнением $E_n + (\hbar^2 k_0^2)/(2m_p) = E$, где E — энергия состояния.

(В невозмущенном случае $C_n(k_0) = 1$, а при $k \neq k_0$ $C_n(k) = 0$).

Гибридные состояния, принадлежащие подзоне n , имеют два масштаба локализации. Большой масштаб (в k -пространстве) для коэффициента $C_n(k)$ соответствует пространственной локализации в латеральном направлении. Наоборот, коэффициенты разложения по нижним подзонам имеют зависимость от k , характерную для делокализованных состояний.

Принадлежащие n -й подзоне гибридные состояния можно выявить по характерным зависимостям величин (10) от энергии в интервале ниже минимума этой подзоны. На рис. 1 показана зависимость величины d_2 от энергии состояний с $m = 0$ в некотором промежутке энергий ниже минимума второй подзоны. Всюду, за исключением узких энергетических интервалов, $d_2 \ll 1$ ($d_1 \approx 1 - d_2 \approx 1$), что соответствует делокализованным состояниям, принадлежащим 1-й подзоне. В окрестности резонансов происходит гибридизация состояний: возрастает доля d_2 вышележащей (2-й) подзоны и соответственно сокращается доля d_1 нижней подзоны. Гибридные состояния, соответствующие максимумам зависимости d_2 от энергии, назовем резонансными состояниями, принадлежащими 2-й подзоне. Аналогично определяются резонансные состояния, принадлежащие произвольной n -й подзоне. Ширину максимумов на зависимости $d_n(E)$ можно отождествить с шириной резонансных уровней [3].

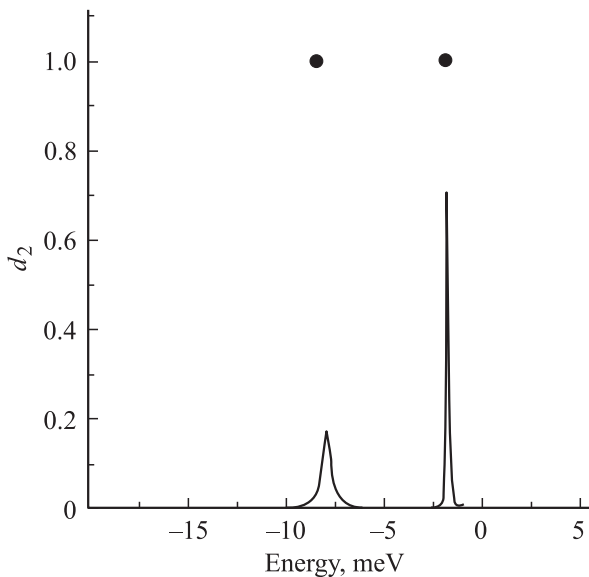


Рис. 1. Зависимость величины d_2 от энергии ($m = 0$). Энергия отсчитывается от минимума 2-й подзоны. Параметры гетероструктуры: слой GaAs толщиной 12 нм заключен между барьерными слоями $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$; донор расположен на расстоянии 5 нм от центра квантовой ямы. Кружками показаны величины d_2 для двух нижних дискретных уровней, возникающих в непрерывном спектре при расположении донора в центре квантовой ямы.

Для симметричных квантовых ям можно провести дополнительную классификацию примесных состояний по симметрии [3]. Интересно, что в случае высокой симметрии (примесь расположена в центре симметричной квантовой ямы) к стационарным состояниям запрещено подмешивание нижней подзоны ($d_1 = 0$). По этой причине резонансные состояния, принадлежащие второй подзоне, становятся чисто локализованными, а ширина резонансов обращается в нуль.

3. Взаимодействие с LO-фононами

Используя макроскопическую теорию [16], можно получить следующий оператор для энергии взаимодействия электронов с LO-фононами:

$$H_{e-ph} = e \sqrt{\frac{\pi \hbar \omega_{LO}}{\epsilon_p R h_c}} \sum_{m, q, q_z} \frac{\sqrt{q} J_m(q\rho)}{Q} \times (b_{mqz} \exp(iq_z z + im\phi - i\omega_{LO} t) + b_{mqz}^+ \exp(-iq_z z - im\phi + i\omega_{LO} t)), \quad (11)$$

$1/\epsilon_p = 1/\epsilon_\infty - 1/\epsilon$, ϵ_∞ и ϵ — высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости; ω_{LO} — частота LO-фононов, которая полагается независимой от волновых чисел фононов, $Q^2 = q^2 + q_z^2$, b_{mqz}^+ и b_{mqz} — безразмерные операторы рождения и уничтожения LO-фонона с проекцией $L_z^{ph} = m\hbar$ момента квазиимпульса на ось z и волновыми числами q и q_z ($[b_{mqz}, b_{mqz}^+] = 1$). В качестве основного объема взят цилиндр с радиусом R и высотой h_c (вдоль оси z). Выражение (11) является асимптотическим при $R \rightarrow \infty$, а волновые числа q при фиксированном m удовлетворяют уравнению (3).

В рассмотренном длинноволновом пределе кристалл можно рассматривать как изотропный континуум, и характеризовать фононы проекциями момента квазиимпульса L_z^{ph} , что эквивалентно выделению колебаний кристаллической решетки с определенной симметрией по отношению к вращениям вокруг оси z . При электрон-фононном взаимодействии сохраняется суммарная проекция момента квазиимпульса электрона и фонона на ось z , что приводит к соответствующим правилам отбора для матричных элементов оператора (11).

Вероятность испускания LO-фонона электроном, находящимся в начальном состоянии $|m, E\rangle$, найдем в 1-м порядке теории возмущений. Если конечные состояния электрона лежат в непрерывном спектре, то из-за его вырождения по проекциям момента импульса электрон может испустить фонон с произвольной проекцией момента, и соответствующая сумма содержит бесконечное число слагаемых. Численный переход к пределу при $R \rightarrow \infty$ предъявляет высокие требования к вычислительной технике, поскольку количество конечных состояний электрона с различными проекциями m , в которые возможны переходы, пропорционально R .

Для вероятности спонтанного испускания LO -фона можно получить приближенную формулу, если пренебречь модификацией конечных состояний электрона потенциалом примеси (см. Приложение):

$$\nu_{m,E}^{spont} = \sum_{s,v} M_{sv},$$

$$M_{sv} = \frac{e^2 m_p \omega_{LO}}{\epsilon_p \hbar^2} \sum_{j,p} C_s^{(m,E)}(k_j) C_v^{(m,E)}(k_j) A_{sv}^p(k_j), \quad (12)$$

$$A_{sv}^p(k_j) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{F_{pv}^*(q_z) F_{ps}(q_z) dq_z}{\sqrt{(k_j^2 - k_p^2)^2 + 2q_z^2(k_j^2 + k_p^2) + q_z^4}}, \quad (13)$$

$$F_{ps}(q_z) = \int g_p(z) \exp(-iq_z z) g_s(z) dz, \quad (14)$$

k_p^2 являются корнями уравнения:

$$E_p + \frac{\hbar^2 k_p^2}{2m_p} + \hbar\omega_{LO} = E, \quad (15)$$

E_p — энергия минимума подзоны с номером p .

Вероятность испускания LO -фона представляет собой свертку по индексам подзон s и v матрицы M_{sv} (12). Каждый диагональный матричный элемент M_{ss} неотрицателен и соответствует рассеянию электрона из канала (подзоны) с номером s . Знак недиагональных матричных элементов M_{sv} ($s \neq v$) зависит от перекрытия в k -пространстве коэффициентов $C_s(k_j)$ и $C_v(k_j)$, соответствующих различным каналам (подзонам) s и v . Сумму всех недиагональных матричных элементов M_{sv} можно интерпретировать как интерференцию каналов рассеяния при электрон-фононном взаимодействии. Интерференционный вклад в частоту ν^{spont} может быть отрицательным, что соответствует подавлению релаксации на фонах.

В квазидвумерном случае в величину (12) дают вклад один или два канала в зависимости от типа начального состояния электрона. Если начальное состояние электрона является делокализованным, то, как отмечалось, его можно характеризовать принадлежностью к какой-либо одной n -й подзоне. Поэтому вклад в вероятность ν^{spont} определяется доминирующим каналом, соответствующим этой подзоне, и рассеяние электрона качественно не отличается от внутри- и межподзонной релаксации в невозмущенной квантовой яме. Для электрона в гибридинированном начальном состоянии вклад в рассеяние на фонах дают, вообще говоря, два канала. Причем в квазидвумерном случае доминируют вклады от диагональных матричных элементов M_{ss} , а интерференционный вклад очень мал. Это обусловлено большим расстоянием между подзонами, что приводит к слабому перекрытию в k -пространстве коэффициентов разложения, соответствующих двум подзонам, формирующим гибридинированное состояние.

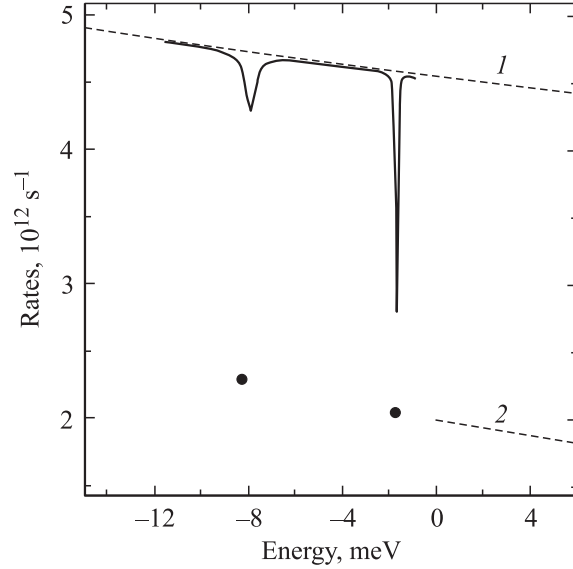


Рис. 2. Зависимость вероятности спонтанного испускания LO -фононов от энергии начального состояния электрона с $m = 0$ (сплошная линия). Пунктирными линиями показаны вероятности испускания LO -фононов при внутривозонных (кривая 1) и межвозонных переходах (кривая 2). Энергия отсчитывается от минимума второй подзоны. Параметры гетероструктуры приведены в подписи к рис. 1; положение примесного центра смещено относительно центра квантовой ямы на 5 нм. Кружками показаны частоты испускания LO -фононов для двух нижних резонансных состояний ($m = 0$) для донора в центре квантовой ямы.

На рис. 2 показана зависимость вероятности ν_0 спонтанного испускания LO -фона от энергии начального состояния электрона с $m = 0$. Интервал энергий ограничен окрестностью двух нижних резонансов под второй подзоной. Всюду, за исключением их окрестностей, ν_0 практически не отличается от темпа внутривозонной релаксации для невозмущенной квантовой ямы. В окрестности резонансов на зависимости ν_0 возникают провалы, обусловленные гибридизацией подзон. Уменьшение частоты спонтанного испускания происходит из-за увеличения доли второй подзоны в гибридинированном состоянии: увеличивается вклад более медленного процесса межподзонной релаксации и уменьшается вклад быстрой внутривозонной релаксации.

Представленные на рис. 2 зависимости качественно не изменятся, если учесть неоднородность диэлектрической проницаемости („силы изображения“) и отличие продольных эффективных масс в квантовой яме и барьерных областях. Оба этих фактора не являются причиной появления провалов на зависимости вероятности испускания фононов от энергии (гибридизацию состояний), они могут изменить лишь глубину и положение провалов.

Для положения примеси в центре квантовой ямы ширина резонансов под второй подзоной обращается в нуль, а резонансные состояния оказываются сформированными только вышележащими подзонами. Для

таких состояний релаксация на LO -фононах носит „межподзонный“ характер (рис. 2). При удалении примесного центра глубоко в барьер вероятность (12) для энергий резонансных состояний стремится к величине, соответствующей межподзонным переходам электронов с испусканием фононов в невозмущенном случае (на рисунке не показано).

4. Поглощение ИК-излучения

В рассматриваемом приближении изолированных примесных центров для вычисления коэффициента поглощения ИК-излучения достаточно знать сечение поглощения σ , соответствующее одному центру. Сечение σ представляет собой отношение поглощаемой в единицу времени энергии к плотности мощности излучения. Температуру будем полагать равной нулю.

При вычислении сечения $\sigma(\omega)$ в среднем ИК-диапазоне заменим δ -функцию Дирака, отвечающую за точный закон сохранения энергии в золотом правиле Ферми, функцией Лоренца:

$$\delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \rightarrow \frac{\Gamma_f/\pi}{(E_f - E_i - \hbar\omega)^2 + \Gamma_f^2}, \quad (16)$$

где E_i и E_f — энергии начального и конечного состояний соответственно, и предполагается, что параметр уширения Γ_f зависит только от конечного состояния. Положим $\Gamma_f = \hbar\nu^{spont}$, где ν^{spont} — частота спонтанного испускания LO -фонона (12).

Для более длинноволнового (дальнего ИК) диапазона учтем только неоднородное уширение линий поглощения. Ограничимся механизмом уширения, связанным с зависимостью энергетического спектра примеси от ее пространственного положения. Тогда сечение поглощения селективно легированной гетероструктуры находится усреднением по положению примесей [17].

4.1. Поглощение ИК-излучения z -поляризации

Рассмотрим электромагнитную волну, имеющую только z -компоненту электрического поля. Оптические переходы возможны для такой поляризации только с сохранением проекции момента импульса на ось z . Диагональные по m матричные элементы z

$$\langle m, E' | z | m, E \rangle = \sum_{m'} z_{n'n} \sum_j C_{n'}^{(m, E')} (k_j) C_n^{(m, E)} (k_j), \quad (17)$$

где $z_{n'n}$ — матричный элемент координаты z на волновых функциях одномерного движения, соответствующих подзонам n' и n .

Рассмотрим матричные элементы (17) для оптических переходов из основного состояния. Для переходов в локализованные состояния, а также в делокализованные состояния, принадлежащие нижней подзоне, матричные элементы малы. В квазидвумерном случае волновые

функции начальных и конечных состояний приближенно представимы в виде произведения волновой функции первой подзоны $g_1(z)$ на функции от ρ и ϕ , которые являются собственными для оператора Гамильтона с двумя латеральными степенями свободы. Матричные элементы z на таких волновых функциях, очевидно, тем меньше, чем лучше работает указанное приближение, т.е. чем больше расстояние между подзонами, и чем ближе ситуация к двумерной.

Для переходов в делокализованные состояния, принадлежащие возбужденным подзонам, матричные элементы (17) малы вследствие слабого перекрытия волновых функций начального и конечного состояний, соответствующих различным масштабам локализации в латеральном направлении. Перекрытие волновых функций в координатном и импульсном пространствах относительно велико только для переходов из основного в резонансные состояния. В квазидвумерном случае матричный элемент (17) максимален для оптических переходов в самые нижние резонансные состояния под возбужденными подзонами. Это объясняется топологически сходной зависимостью от k коэффициентов разложения для начальных и конечных состояний.

На рис. 3 показано сечение поглощения ИК-излучения для разных положений примесного центра в квантовой яме. Максимум сечения соответствует оптическим переходам в нижнее резонансное состояние под второй

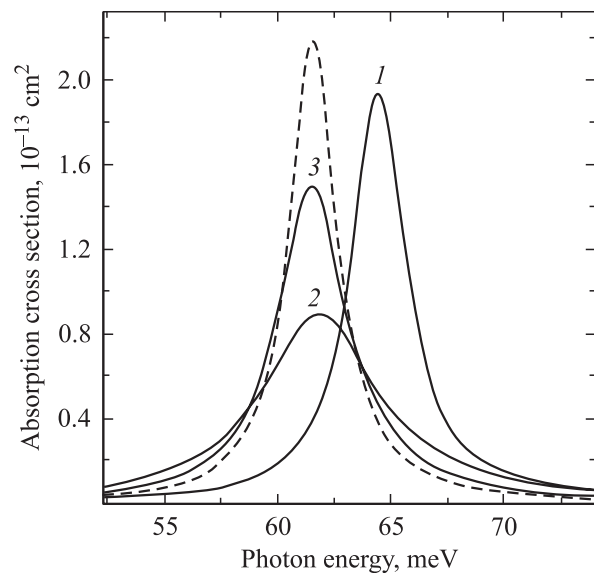


Рис. 3. Сечение поглощения излучения z -поляризации. Параметры гетероструктуры приведены в подписи к рис. 1. Сплошными линиями показаны сечения поглощения для примесного центра, расположенного в центре квантовой ямы (кривая 1), на расстоянии 5 нм (кривая 2) и на расстоянии 14 нм от центра квантовой ямы (кривая 3). Пунктиром показано сечение поглощения для межподзонных переходов в невозмущенной квантовой яме.

подзоной. Для сравнения пунктирной линией показано сечение поглощения на межподзонных оптических переходах в невозмущенной квантовой яме. При изменении положения примеси в квантовой яме меняется как ширина линии поглощения, так и ее сдвиг относительно максимума поглощения для межподзонных переходов. За сдвиг линии отвечает разность энергий связи основного и нижнего резонансного состояния. (Энергия связи резонансного состояния определяется как разность между минимумом близлежащей верхней подзоны и энергией резонансного состояния). Поскольку основной вклад в поглощение излучения вносят оптические переходы из основного в гибридизированные состояния в окрестности нижних резонансов под каждой из подзон, частота этих переходов изменяется на указанную величину разности энергий связи. При удалении примесного центра от квантовой ямы эта разность стремится к нулю вместе с энергиями связи, и положение линии поглощения стремится к положению максимума поглощения для межподзонных переходов.

Для всех положений донора форма линии поглощения определяется однородным уширением вследствие взаимодействия с фононами [формула (16)]. В зависимости от положения примеси темп испускания LO -фононов изменяется от $2 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$ для донора далеко в глубине барьера до $4.3 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$ при расстоянии 5 нм от него до центра квантовой ямы (рис. 2), что соответствующим образом отражается на ширине линий.

Экспериментальное обнаружение указанной зависимости ширины линии поглощения от положения доноров (слоев δ -образного легирования в гетероструктуре) сопряжено, однако, с большими трудностями. В типичных случаях линии поглощения имеют нелоренцеву форму, а их ширины превышают рассчитанные в приведенном примере величины. Это обусловлено наличием нескольких механизмов уширения, которые не принимались во внимание при расчетах.

4.2. Нормальное падение излучения

Рассмотрим циркулярно поляризованную волну $\mathbf{E}_{\pm} = (E_0 \sin(\omega t), \mp E_0 \cos(\omega t), 0)$ (пренебрегаем в дипольном приближении зависимостью электрического поля \mathbf{E}_{\pm} от координат). Оператор взаимодействия с электромагнитным полем выберем в форме $V_{\pm}(t) = e\mathbf{E}_{\pm} \cdot \mathbf{r}$. Используя коммутационное соотношение этого оператора с гамильтонианом, можно получить следующее выражение для матричных элементов координатной части оператора возмущения V_{\pm}^{abs} , соответствующей поглощению фотонов:

$$\langle m', E' | V_{\pm}^{abs} | m, E \rangle = \mp \frac{eE_0 \hbar^2 \langle m', E' | k_{\pm} | m, E \rangle}{2im_{\rho}(E' - E_m)}, \quad (18)$$

где оператор k_{\pm}

$$k_{\pm} = \mp \exp(\pm i\varphi) \left(\frac{\partial}{\partial \rho} \pm \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (19)$$

Матричные элементы операторов k_{\pm} отличны от нуля только для оптических переходов с изменением m на ± 1 :

$$\langle m \pm 1, E' | k_{\pm} | m, E \rangle = \sum_{n,j} C_n^{(m \pm 1, E')} (k_j) k_j C_n^{(m, E)} (k_j). \quad (20)$$

В этом выражении опущены бесконечно малые при $R \rightarrow \infty$. В сумму (20) входят диагональные по индексам подзон коэффициенты разложения. В квазидвумерном случае основное состояние принадлежит первой подзоне ($d_1 \approx 1$), поэтому оптические переходы из этого состояния разрешены лишь в состоянии, для которых $d_1 \approx 1$. Поглощение ИК-излучения данной поляризации носит, таким образом, „внутриподзонный“ характер: разрешены переходы в локализованные состояния и состояния $2D$ -континуума, сформированные нижней подзоной. Если энергия оптического перехода значительно превышает энергию связи донора, то соответствующий матричный элемент очень мал в силу слабого перекрытия в k -пространстве множителей в сумме (20). По этой причине очень мал матричный элемент для переходов в резонансные состояния под 2-й подзоной. Кроме того, в окрестности этих резонансов уменьшается величина d_1 , что соответствует провалам на зависимости сечения поглощения от частоты. Однако при учете различных механизмов уширения такие провалы практически не проявляются даже для квантовых ям с малым расстоянием между подзонами (порядка 15 мэВ).

Рассмотрим механизм неоднородного уширения, связанный с зависимостью энергетического спектра донора от его положения по координате z в квантовой яме. Поскольку зависимость разности энергий локализованных состояний от z может иметь экстремумы, в зависимости коэффициента поглощения от частоты возникают особенности Ван Хова [17]. В приведенных расчетах сечения поглощения (рис. 4) данные особенности были устранены процедурой выкалывания окрестностей экстремальных точек. Процедура является вариантом усреднения [17] с учетом того, что примеси замещения находятся в определенных атомных плоскостях. В окрестностях экстремальных точек с размерами порядка постоянной решетки плотность распределения примесей в соответствующих интегралах полагалась равной нулю.

Предполагалось, что доноры распределены по закону Гаусса с дисперсией 0.6 и 1 нм. Центр распределения смещен относительно центра квантовой ямы на расстояние 2 нм. Низкочастотный максимум сечения поглощения для обоих случаев обусловлен оптически-ми переходами из основного состояния в самые нижние состояния с $m = \pm 1$ доноров, расположенных в окрестности максимума концентрации (распределения). Особенности Ван Хова проявляются в виде резких обрывов с высокочастотной стороны максимума только для широкого распределения примесей, поскольку вблизи соответствующей экстремальной точки (центра

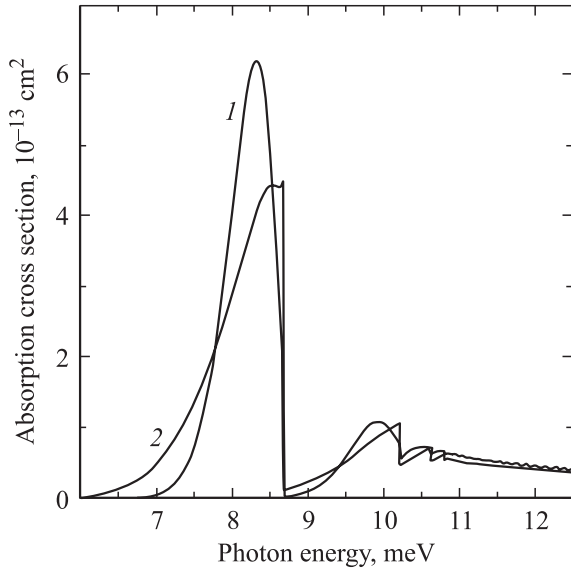


Рис. 4. Сечение поглощения циркулярно поляризованного излучения. Параметры гетероструктуры приведены в подписи к рис. 1. Плотность примесей соответствует распределению Гаусса, центр которого находится на расстоянии 2 нм от центра квантовой ямы. Кривая 1 соответствует дисперсии 0.6 нм, а кривая 2 — 1 нм.

квантовой ямы) концентрация примесей сравнительно велика. В экспериментальных зависимостях коэффициента поглощения подобные спектральные особенности сглаживаются из-за наличия других механизмов уширения. Оптические переходы в следующие возбужденные локализованные состояния доноров и в $2D$ -континуум дают для обоих распределений почти сливающиеся вклады в сечение поглощения.

5. Заключение

Показано, что полярное электрон-фононное взаимодействие модифицируется вблизи энергий резонансных состояний. Эта модификация обусловлена гибридизацией подзон размерного квантования. Испускание фонона электроном, находящимся в гибридизованном состоянии — существенно многоканальный процесс, причем в квазидвумерном случае в нем участвуют два слабо интерферирующих канала. Один канал соответствует взаимодействию фонона с электроном, локализованным на примесном центре. Второй канал отвечает уходу электрона от примеси из-за туннелирования в континуум нижележащей подзоны и внутривозвонному испусканию LO -фонона.

Поглощение ИК-излучения z -поляризации обусловлено оптическими переходами из основного состояния донора в гибридизованные состояния. Наоборот, в частотной зависимости сечения поглощения излучения при его нормальном падении резонансные состояния не проявляются. Это относится к случаям, когда расстояние

между подзонами размерного квантования значительно превышает энергию связи доноров. Поглощение нормально падающего излучения обусловлено в этом случае оптическими переходами между локализованными состояниями доноров и примесно-зонными оптическими переходами.

Работа выполнена при финансовой поддержке Совета по грантам президента Российской Федерации (грант № МК-2442.2003.02) и РФФИ (грант № 03-02-16775).

Приложение

Получим формулу (12). Для энергий и волновых функций конечных состояний воспользуемся выражениями, соответствующими свободной от примеси квантовой ямы. Применим следующий вычислительный прием. Квадрат модуля матричного элемента в золотом правиле Ферми является произведением двух комплексно-сопряженных интегралов. Поменяем порядок суммирования по квантовым числам в правиле Ферми и интегрирования по координатам в одном из этих сомножителей. Тогда частоту спонтанного испускания можно представить как результат действия интегрального оператора на функцию от начального состояния электрона:

$$v_{m,E}^{spont} = \frac{2\pi^4 \omega_{LO} e^2}{R^3 \hbar c \epsilon_p} \sum_{is} \sqrt{k_i} C_s(k_i) \int_0^R K_s(\rho) J_m(k_i \rho) \rho d\rho, \quad (\text{П.1})$$

где ядро оператора

$$K_s(\rho) = \sum_{q,m',q_z,j,v,p,k_f} \frac{q \sqrt{k_j} C_v(k_j) F_{ps}(q_z) F_{pv}^*(q_z)}{q^2 + q_z^2} \times J_{m'}(q\rho) J_{m-m'}(k_f \rho) \delta(E - E_p(k_f) - \hbar\omega_{LO}) \times \int_0^R J_{m-m'}(k_f r) J_{m'}(qr) J_m(k_j r) r dr, \quad (\text{П.2})$$

$E_p(k_f)$ — невозмущенные энергии конечных состояний.

Заменяем интеграл по r в (П.2) его предельным значением при $R \rightarrow \infty$ [14] и просуммируем по m' , воспользовавшись „теоремой сложения“ для функций Бесселя [18]. Пользуясь правилом (4), заменим суммирование по q на интегрирование. Интеграл легко берется, если перейти к новой переменной интегрирования θ_2 : $k_p^2 = k_j^2 + k_l^2 + 2k_j k_l \cos \theta_2$.

Перейдем затем в ядре (П.2) от суммирования к интегрированию по переменным k_f и q_z . Формула (12) получается после подстановки $K_s(\rho)$ в выражение (П.1), интегрирования по ρ и суммирования по j с использованием ортогональности функций Бесселя (5).

Список литературы

- [1] C. Priester, G. Allan, M. Lannoo. Phys. Rev. B, **29**, 3408 (1984).
- [2] R.L. Greene, K.K. Bajaj. Phys. Rev. B, **31**, 4006 (1985).
- [3] A. Blom, M.A. Odnoblyudov, I.N. Yassievich, K.-A. Chao. Phys. Rev. B, **68**, 165 338 (2003).
- [4] T.A. Perry, R. Merlin, B.V. Shanabrook, J. Comas. Phys. Rev. Lett., **54**, 2623 (1985).
- [5] M. Helm, F.M. Peeters, F. DeRosa, E. Colas, J.P. Harbison, L.T. Florez. Phys. Rev. B, **43**, 13 983 (1991).
- [6] В.Я. Алешкин, Б.А. Андреев, В.И. Гавриленко, И.В. Ерофеева, Д.В. Козлов, О.А. Кузнецов. ФТП, **34**, 582 (2000).
- [7] K. Jayakumar, S. Balasubramanian, M. Tomak. Phys. Rev. B, **34**, 8794 (1986).
- [8] A. Blom, M.A. Odnoblyudov, I.N. Yassievich, K.-A. Chao. Phys. Rev. B, **65**, 155 302 (2002).
- [9] S.T. Yen. Phys. Rev. B, **66**, 075 340 (2002).
- [10] S.T. Yen. Phys. Rev. B, **68**, 165 331 (2003).
- [11] N.A. Bekin, L.V. Krasilnikova, S.G. Pavlov, V.N. Shastin. Phys. Status Solidi C, **0**(2), 661 (2003).
- [12] V.Ya. Aleshkin, L.V. Krasil'nikova. Proc. 11th Int. Symp. „Nanostructures: Physics and Technology“ (St. Petersburg, Russia, 2003) p. 70.
- [13] В.Я. Алешкин, Л.В. Красильникова. Тез. докл. VI Росс. конф. по физике полупроводников (СПб., 2003) с. 426.
- [14] А.П. Прудников, Ю.А. Брычков, О.И. Маричев. Интегралы и ряды. Специальные функции (М., Наука, 1983).
- [15] S. Fraizzoli, F. Bassani, R. Buczko. Phys. Rev. B, **41**, 5096 (1990).
- [16] М. Борн, Хуан Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток (М., Иностр. лит., 1958).
- [17] R.L. Greene, K.K. Bajaj. Phys. Rev. B, **34**, 951 (1986).
- [18] Н.Я. Виленкин. Специальные функции и теория представлений групп (М., Наука, 1965).

Редактор Л.В. Беляков

Resonant donor states in quantum wells

N.A. Bekin

Institute For Physics of Microstructures,
Russian Academy of Sciences,
603950 Nizhny Novgorog, Russia

Abstract The spectrum, the wave function of resonant shallow donor states in quantum wells have been calculated. The calculations have been made in an envelope-function approximation for GaAs/AlGaAs heterostructures. An expression for LO-phonon-emission rate has been obtained. It is shown that in the vicinity of resonant state energies the polar electron-phonon interaction is being modified. The modification occurs due to a hybridization of the quantum well subbands which makes an electron interact with the phonons through two channels (subbands) at once. Infrared radiation absorption cross section has been calculated taking into account homogeneous (for mid-infrared range) and inhomogeneous broadening (for far-infrared range). The absorption of an infrared radiation with the electric field perpendicular to heterointerfaces occurs due to optical transitions into electron states in the vicinity of resonances. The homogeneous broadening as well as the LO-phonon-scattering rate depend on the width of resonant states (the degree of subband hybridization).