

# Энергетическая структура неводородоподобных примесей в квантовых ямах без спин-орбитального взаимодействия

© К.С. Романов<sup>¶</sup>, Н.С. Аверкиев

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

(Получена 24 ноября 2011 г. Принята к печати 8 декабря 2011 г.)

Рассмотрены состояния дырки, локализованной на акцепторе в квантовой яме, из полупроводника с кубической симметрией без спин-орбитального взаимодействия (симметрия  $\Gamma_{15}$ ). Показано, что трехкратно вырожденный уровень расщепляется, рассчитаны энергии уровней в зависимости от ширины ямы.

## 1. Введение

Свойства полупроводниковых наноструктур во многом определяются концентрацией и энергетической структурой содержащихся в них примесей и дефектов. Потенциал примеси обычно имеет сложную форму, состоящую из короткодействующей и длиннодействующей кулоновских частей. Чаще всего потенциал примесей в полупроводниках считают целиком кулоновским [1–3]. При расчете энергетической структуры примеси в объемном кубическом кристалле с простой параболической зоной методом эффективной массы эта модель приводит к энергии связи, получающейся из энергии ионизации атома водорода заменой масс носителей на эффективные массы и учетом диэлектрической проницаемости.

Однако для большого числа примесей экспериментально определенная энергия связи значительно отличается от предсказаний модели кулоновского центра в рамках метода эффективной массы. Для расчета волновых функций и структуры уровней таких дефектов используют модель потенциала нулевого радиуса, в которой рассматривается только короткодействующая часть потенциала примеси, а кулоновский вклад не учитывается. В таком подходе энергия связи является параметром модели, определяющим граничное условие на волновую функцию вблизи примеси, а не результатом расчета.

Однако в наноструктурах можно связать энергию связи в объемном образце с граничным условием на волновую функцию в месте расположения дефекта и считать, что такое граничное условие сохраняется и в квантовой точке или квантовой яме, т.е. определить параметр модели из энергии связи объемного образца. Важным достоинством метода потенциала нулевого радиуса является то, что он позволяет точно учесть особенности зонной структуры материалов и граничные условия на гетерограницах.

В рамках такого подхода были рассмотрены примеси в квантовых ямах с простой зоной [4] и акцепторные примеси в полупроводниках на основе арсенида галлия с валентной зоной с симметрией  $\Gamma_8$  [5]. Предсказания модели довольно хорошо согласуются с результатами

экспериментов [6,7]. В последнее время активно синтезируются наноструктуры на основе кремния, имеющего валентную зону с симметрией  $\Gamma_{15}$ , где спин-орбитальное взаимодействие несущественно в отличие от зон GaAs и Ge.

Цель данной работы — расчет волновых функций и энергии связи акцепторов, находящихся в квантовой яме из кремния в рамках метода потенциала нулевого радиуса. Для простоты изучен случай бесконечно глубокой квантовой ямы с примесью, находящейся точно на ее середине.

## 2. Теория

Рассмотрим квантовую яму с бесконечно высокими стенками, параллельную плоскости  $xu$  и простирающуюся вдоль оси  $z$  от  $-a/2$  до  $a/2$ . Пусть дефект будет расположен строго посередине ямы, в точке  $x = y = z = 0$ .

В рамках метода потенциала нулевого радиуса потенциал дефекта задается с помощью специального граничного условия, а не слагаемым в уравнении Шрёдингера. Это граничное условие ставится на асимптотику волновой функции вблизи центра:

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

где  $\psi$  — волновая функция, а  $\alpha$  — коэффициент, определяемый силой потенциала дефекта. Вблизи дефекта все сферически не симметричные компоненты волновой функции, имеющие сложную угловую структуру, должны обнуляться, иначе граничное условие будет зависеть от направления и угловая компонента импульса разойдется вблизи дефекта. Поэтому в уравнение (1) можно подставлять усредненную по углам волновую функцию.

Для описания состояний в зоне  $\Gamma_{15}$  мы будем пользоваться гамильтонианом, описывающим зоны с такой симметрией, приведенным в [8]. Для простоты мы не будем учитывать кубическую анизотропию, используя сферическое приближение. Поскольку система обладает осевой симметрией с осью  $z$ , удобно перейти от базиса  $X, Y, Z$  к базису собственных функций оператора  $\hat{l}_z$ , т.е.

<sup>¶</sup> E-mail: const@stella.ioffe.ru

к функциям

$$\frac{X + iY}{2}, \quad Z, \quad \frac{X - iY}{\sqrt{2}},$$

соответствующим проекциям момента  $l_z$  равным 1, 0 и  $-1$ .

В этом базисе в импульсном представлении исходный гамильтониан объемного материала примет вид [9,10]:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \frac{(L+M)}{2}(k_x^2 + k_y^2) + Mk_z^2 & \frac{L-M}{\sqrt{2}}(k_x - ik_y)k_z & \frac{L-M}{2}(k_x - ik_y)^2 \\ \frac{L-M}{\sqrt{2}}(k_x + ik_y)k_z & M(k_x^2 + k_y^2) + Lk_z^2 & \frac{L-M}{\sqrt{2}}(k_x - ik_y)k_z \\ \frac{L-M}{2}(k_x + ik_y)^2 & \frac{L-M}{\sqrt{2}}(k_x + ik_y)k_z & \frac{(L+M)}{2}(k_x^2 + k_y^2) + Mk_z^2 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Состояния частиц, описываемые этим гамильтонианом, в объемном материале имеют спектр

$$E_L(\mathbf{k}) = L(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \\ E_{1,2}(\mathbf{k}) = M(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2). \quad (3)$$

Поскольку система однородна только вдоль осей  $x$  и  $y$ , удобно перейти в смешанное координатно-импульсное представление —  $(k_x, k_y, z)$ , или в цилиндрических координатах  $(k, \phi, z)$ . Согласно методу потенциала нулевого радиуса, волновая функция локализованного состояния представляет собой один из столбцов функции Грина  $G(k, \phi, z)$  уравнения Шрёдингера:

$$\hat{H}G(k, \phi, z) = I\delta(z) + EG(k, \phi, z).$$

Здесь  $I$  — единичная матрица  $3 \times 3$ . Помимо этого уравнения, на волновую функцию дополнительно накладываются условия обнуления всех ее компонент на границах ямы,  $G(k, \phi, z = \pm \frac{a}{2}) = 0$ .

Понятно, что волновые функции  $\Psi(\mathbf{k}, z)$  — столбцы функции Грина  $G(k, \phi, z)$  слева и справа от плоскости  $z = 0$  — складываются из плоских волн — собственных функций гамильтониана (2). У интересующих нас состояний с отрицательной энергией, согласно дисперсионным соотношениям (3), поперечный импульс должен быть мнимым. Таким образом, волновые функции связанных состояний дефекта  $\Psi(k, \phi, z)$  представимы в виде:

при  $z > 0$

$$\Psi(\mathbf{k}, z) = c_L^+(\mathbf{k})\chi_L^+(\mathbf{k})e^{\lambda_L z} + c_L^-(\mathbf{k})\chi_L^-(\mathbf{k})e^{-\lambda_L z} \\ + c_1^+(\mathbf{k})\chi_1^+(\mathbf{k})e^{\lambda_1 z} + c_1^-(\mathbf{k})\chi_1^-(\mathbf{k})e^{-\lambda_1 z} \\ + c_2^+(\mathbf{k})\chi_2^+(\mathbf{k})e^{\lambda_2 z} + c_2^-(\mathbf{k})\chi_2^-(\mathbf{k})e^{-\lambda_2 z}; \quad (4)$$

при  $z < 0$

$$\Psi(\mathbf{k}, z) = d_L^+(\mathbf{k})\chi_L^+(\mathbf{k})e^{\lambda_L z} + d_L^-(\mathbf{k})\chi_L^-(\mathbf{k})e^{-\lambda_L z} \\ + d_1^+(\mathbf{k})\chi_1^+(\mathbf{k})e^{\lambda_1 z} + d_1^-(\mathbf{k})\chi_1^-(\mathbf{k})e^{-\lambda_1 z} \\ + d_2^+(\mathbf{k})\chi_2^+(\mathbf{k})e^{\lambda_2 z} + d_2^-(\mathbf{k})\chi_2^-(\mathbf{k})e^{-\lambda_2 z}. \quad (5)$$

Спиноры  $\chi_\alpha^\pm$ , соответствующие плоским волнам, бегущим в плоскости  $xu$  и убывающим или возрастающим вдоль оси  $OZ$ , выражаются по формулам:

$$\chi_L^\pm = \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ \mp\sqrt{2i}\frac{\lambda_L}{k} \\ e^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad \chi_1^\pm = \begin{pmatrix} -e^{-i\phi} \\ 0 \\ e^{i\phi} \end{pmatrix}, \\ \chi_2^\pm = \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ \pm\frac{i}{\sqrt{2}}\frac{k}{\lambda} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

„Поперечные импульсы“  $\lambda_L$  и  $\lambda$  получаются из дисперсионных соотношений (3):

$$\lambda_L = k^2 - \frac{E}{L}, \quad \lambda = k^2 - \frac{E}{M}. \quad (7)$$

Задача состоит в том, чтобы определить выражения для коэффициентов  $c_L^\pm$  и  $d_L^\pm$  из граничных условий при  $z = 0$ . А затем определить энергию уровня  $E$  из граничного условия  $\Psi(\mathbf{k}, \pm a/2) = 0$ . Для упрощения можно воспользоваться симметрией системы относительно плоскости  $z = 0$ .

Полные волновые функции должны быть либо симметричны, либо антисимметричны относительно преобразования  $z \rightarrow -z$ . Принимая во внимание то, что базис

$$\frac{X + iY}{\sqrt{2}}, \quad Z, \quad \frac{X - iY}{\sqrt{2}}$$

при отражении  $z \rightarrow -z$  переходит в

$$\frac{X + iY}{\sqrt{2}}, \quad -Z, \quad \frac{X - iY}{\sqrt{2}},$$

и используя явные выражения для  $\chi_\alpha^\pm$ , получим соотношения между константами  $c_\alpha^\pm$  и  $d_\alpha^\pm$  для состояний, симметричных относительно отражения  $z \rightarrow -z$ :

$$d_L^\pm = c_L^\mp, \quad d_1^\pm = c_1^\mp, \quad d_2^\pm = c_2^\mp, \quad (8)$$

а для антисимметричных:

$$d_L^\pm = -c_L^\mp, \quad d_1^\pm = -c_1^\mp, \quad d_2^\pm = -c_2^\mp. \quad (9)$$

Теперь рассмотрим граничные условия на волновую функцию при  $z = 0$ . Эти граничные условия получаются и двукратным интегрированием уравнения Шрёдингера по  $z$  от  $0^-$  до  $0^+$ .

В результате интегрирования для каждой волновой функции, являющейся столбцом функции Грина, получится своя система уравнений. Эти системы уравнений для разных столбцов отличаются лишь правой частью, которая порождается интегрированием  $\delta$ -функции, умноженной на соответствующий столбец единичной матрицы. Поэтому выпишем все эти системы вместе, для удобства обозначив столбцы функции Грина, соответствующие проекциям момента  $l_z = +1, 0, -1$ , номерами  $i = 1, 2, 3$  соответственно.

Для симметричных относительно преобразования  $z \rightarrow -z$  состояний однократное интегрирование уравнения Шрёдингера дает уравнения (каждому состоянию с  $l_z = +1, 0, -1$  соответствует свой набор констант  $c_L^\pm, c_{1,2}^\pm$ )

$$e^{-i\phi} [\lambda_L(c_L^+ - c_L^-) - \lambda(c_1^+ - c_1^-) + \lambda(c_2^+ - c_2^-)] = \delta_{i1},$$

$$0 = \delta_{i2},$$

$$e^{i\phi} [\lambda_L(c_L^+ - c_L^-) + \lambda(c_1^+ - c_1^-)] = \delta_{i3}, \quad (10)$$

а двукратное интегрирование приводит к уравнению непрерывности

$$2\lambda_L(c_L^+ - c_L^-) + k^2(c_2^+ - c_2^-) = 0, \quad (11)$$

где  $\delta_{ij}$  — символ Кронекера. Видно, что из второго уравнения системы (10) следует, что  $i \neq 2$ , т.е. не существует симметричного относительно  $z \rightarrow -z$  состояния с  $l_z = 0$ . Однако значения  $i = 1, 3$ , соответствующие  $l_z = \pm 1$ , являются допустимыми. Таким образом, есть два состояния, симметричных относительно  $z \rightarrow -z$  с проекциями момента импульса  $\hat{l}_z = \pm 1$ .

Теперь рассмотрим антисимметричный случай. Однократное интегрирование дает уравнения (здесь  $i = 1, 2, 3$  тоже соответствует состояниям с  $l_z = +1, 0, -1$ )

$$0 = \delta_{i1},$$

$$-\frac{i\sqrt{2}}{k} [k^2(c_2^+ + c_2^-) + 2\lambda_L^2(c_L^+ + c_L^-)] = \delta_{i2},$$

$$0 = \delta_{i3},$$

а двукратное

$$(c_L^+ + c_L^-) - (c_1^+ + c_1^-) + (c_2^+ + c_2^-) = 0$$

$$(c_L^+ + c_L^-) + (c_1^+ + c_1^-) = 0. \quad (13)$$

Эти выражения означают, что существует лишь одно антисимметричное относительно преобразования  $z \rightarrow -z$  состояние. У этого состояния проекция момента  $l_z = 0$ .

С помощью уравнений (10)–(13) можно найти соотношения между константами  $c_\alpha^+$  и  $c_\alpha^-$  для всех трех состояний с  $l_z = \pm 1, 0$ . Граничные условия при  $z = \pm a/2$  определяют еще две константы. Оставшаяся константа будет определяться из условий нормировки.

Соответствие между энергией  $E$  и константой  $\alpha$  можно получить, переведя волновые функции из представления  $(\mathbf{k}, z)$  в координатное. При этом часть волновой функции, пропорциональная  $1/k$  при  $k \rightarrow \infty$ , переходит в  $1/r$  асимптотику при  $r \rightarrow 0$ .

Получившиеся выражения для волновых функций слишком громоздки, поэтому мы их здесь не приводим. Энергетический спектр рассчитывается численно.

### 3. Обсуждение результатов

На рис. 1 и 2 показаны численно рассчитанные зависимости энергии локализованных уровней относительно нижнего уровня размерного квантования от ширины квантовой ямы для глубокого и мелкого акцепторов соответственно. Параметр  $\alpha$  выбирался так, чтобы энергии связи локализованного уровня в яме бесконечной ширины (объемном полупроводнике) были равны 160.0 и 16.0 мэВ. Константы гамильтониана соответствуют параметрам валентной зоны кремния.

Видно, что с уменьшением ширины ямы энергия перехода между уровнями размерного квантования и локализованными уровнями увеличивается. Основные уровни соответствуют проекциям момента импульса  $l_z = \pm 1$ , а возбужденные —  $l_z = 0$ , аналогично энергетическому расположению уровней размерного квантования в яме.

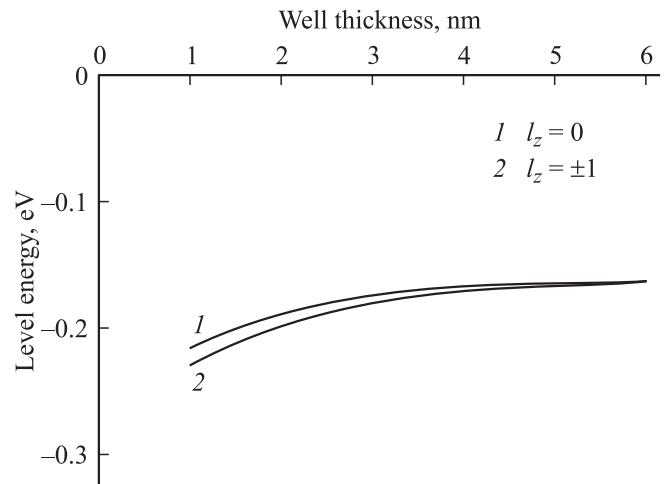


Рис. 1. Зависимости энергии уровня глубокого центра (160 мэВ) в квантовой яме Si от ширины ямы. Энергия отсчитывается от дна зоны.

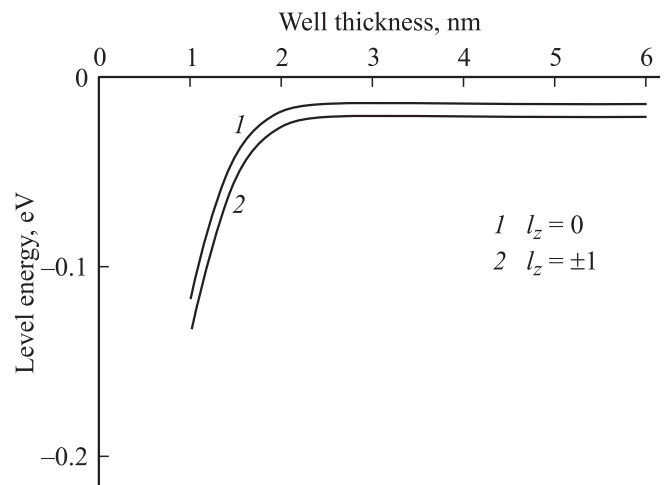


Рис. 2. Зависимости энергии уровня мелкого центра (16 мэВ) в квантовой яме Si от ширины ямы. Энергия отсчитывается от дна зоны.

Такое поведение согласуется с поведением состояний, локализованных на короткодействующем потенциале внутри квантовой ямы как для простой зоны, так и для зоны с симметрией  $\Gamma_8$  [5].

В работе [5] были рассчитаны волновые функции и уровни энергии частицы, локализованной на дефекте с короткодействующим потенциалом в квантовой яме из полупроводника с зоной  $\Gamma_8$ . Расчет проводился таким же методом, как и в этой работе. Как показала дополнительная проверка, не все компоненты волновых функций в [5] обнуляются на границах квантовой ямы. Чтобы обнулить их, к приведенным решениям нужно подмешивать и сопряженные по времени базисные функции.

Однако, из-за того дырка сильно локализована на дефекте даже в квантовых ямах шириной  $150 \text{ \AA}$ , необнуляющиеся компоненты рассчитанных волновых функций на границах ямы очень малы. Соответственно коэффициентами при подмешиваемых функциях можно пренебречь.

В результате оказывается, что точно рассчитанные состояния по величине отличаются от приведенных в [5] незначительно, а поправка к уровням энергии лежит за пределами точности эксперимента.

Таким образом, в данной работе проведены расчеты энергетической структуры примеси, обладающей короткодействующим потенциалом. Это может быть как глубокая примесь, так и мелкий неводородоподобный центр, к примеру  $A^+$ -центр. Показано, что влияние гетероструктуры приводит к двукратному расщеплению исходно трехкратно вырожденного уровня. Определены энергии ионизации уровней в зависимости от ширины квантовой ямы.

Определенные нами симметрии волновых функций позволяют предсказать поведение системы в магнитном поле, поперечном плоскости ямы.

Работа частично поддержана проектами РФФИ, программами президиума РАН и ОФН РАН, Министерством образования и науки Российской Федерации договором 11.G34.0001 с СПбГПУ и ведущим ученым Г.Г. Павловым и контрактом № 14.740.11.0892.

## Список литературы

- [1] W.T. Masselink, Y.-C. Chang, H. Morkoc. *Phys. Rev. B*, **28**, 7373 (1983).
- [2] В.И. Белявский, М.В. Гольдфарб, Ю.В. Копаев. *ФТП*, **31**, 1095 (1997).
- [3] В.Я. Алёшкин, Б.А. Андреев, В.И. Гавриленко, И.В. Ерофеева, Д.В. Козлов, О.А. Кузнецов. *ФТП*, **34**, 582 (2000).
- [4] А.А. Пахомов, К.В. Халипов, И.Н. Ясиевич. *ФТП*, **30**, 1387 (1996).
- [5] Н.С. Аверкиев, А.Е. Жуков, Ю.И. Иванов, П.В. Петров, К.С. Романов, А.А. Тонких, В.М. Устинов, Г.Е. Цырлин. *ФТП*, **38**, 222 (2004).
- [6] Ю.Л. Иванов, П.В. Петров, А.А. Тонких, Г.Э. Цырлин, В.М. Устинов. *ФТП*, **37**, 91 (2003).
- [7] Н.В. Агринская, Ю.Л. Иванов, В.М. Устинов, Д.А. Полоскин. *ФТП*, **35**, 571 (2000).
- [8] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М., Наука, 1972).
- [9] В.И. Перель, И.Н. Ясиевич. *ЖЭТФ*, **82**, 237 (1982).
- [10] Ю.Л. Иванов, П.В. Петров, А.А. Тонких, Г.Э. Цырлин, В.М. Устинов. *ФТП*, **37**, 91 (2003).

*Редактор Т.А. Полянская*

## Energy structure of non hydrogen-like impurities in quantum wells without spin-orbit interaction

K.S. Romanov, N.S. Averkiev

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

**Abstract** We considered hole localized on acceptor in quantum well with cubic symmetry without spin-orbit interaction ( $\Gamma_{15}$  symmetry). It was shown that three-fold degenerated level is splitted. Dependencies of levels energies on quantum well width were found.