

УДК 621.315

ОПТИЧЕСКОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ, ОБУСЛОВЛЕННОЕ ПЕРЕХОДАМИ МЕЖДУ ДОНОР-АКЦЕПТОРНЫМИ ПАРАМИ В ПАРАБОЛИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ЯМЕ

А.А. КОСТАНЯН

Российско-Армянский (Славянский) государственный университет, Ереван

(Поступила в редакцию 10 января 2007 г.)

Изучено межпримесное оптическое поглощение в параболической квантовой яме. В предположении слабого легирования определены вероятности перехода “акцептор–донор” и вычислен соответствующий коэффициент поглощения света. При этом, в рамках модели ближайшего соседа, учтено уширение примесных уровней, связанное с распределением донор-акцепторных пар по расстоянию. Определен характер зависимости коэффициента поглощения от концентрации доминирующей примеси, а также изучено “синее смещение” в спектре поглощения.

1. Введение

Наряду с традиционными методами исследования структурных неоднородностей твердых тел, существует также возможность изучения этих образований с помощью оптических методов [1-3]. В частности, при изучении спектров оптического излучения или поглощения полупроводниками (как массивными, так и размерно-квантованными) можно получить представление об особенностях распределения дефектов в изучаемых образцах. Это тем более важно, что используемые в оптоэлектронике полупроводниковые соединения, как правило, всегда содержат дефекты (дислокации, донорные или же акцепторные центры), наличие которых может существенным образом отразиться на их физических характеристиках. Поэтому вполне естественным является вопрос об изучении влияния различных неоднородностей на характер оптического поглощения или же излучения в полупроводниковых соединениях. В частности, наличие примесных центров в полупроводниковых структурах существенным образом влияет на характер оптического спектра поглощения.

Ранее, в работах [4-6] было изучено примесное поглощение в полупроводниковых квантовых ямах (КЯ). Так, авторы [4] на основе вариационного метода рассмотрели оптические переходы между зоной валентности и донорными уровнями в КЯ из $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ с прямоугольным ограничивающим потенциалом конечной высоты. Аналогичная задача была рассмотрена в работе [5], где, однако, исследовалась КЯ с прямоугольным, бесконечно глубоким ограничивающим потенциалом, при этом донорные уровни описывались в рамках модели двумерного водородоподобного атома. Позже, в работе [6] на основе вариационного метода был вычислен коэффициент поглощения (КП), обусловленный переходами между зоной валентности и основным донорным уровнем, а также между основным акцепторным уровнем и зоной

проводимости в параболической КЯ.

Следует отметить, что наряду с переходами “примесь → зона” и “зона → примесь”, возможны также переходы “примесь → примесь” [7]. Отметим, что ранее в работе [8] был рассчитан межпримесный КП дополнительной слабой волны в поле резонансного лазерного излучения для массивного полупроводника при условиях слабого легирования ($R \geq a_d, a_a$, где a_d, a_a – соответственно, боровские радиусы донора и акцептора, а R – среднее расстояние донорно-акцепторной пары (ДАП)). Задача была ограничена случаем $a_d \ll a_a$, что хорошо выполняется для многих полупроводников и умеренной концентрации доминирующей примеси. При этом было учтено уширение примесных уровней, связанное с межпримесным распределением пар по расстоянию R , в результате которого возникает необходимость усреднения ДАП по расстоянию.

Важной особенностью низкоразмерных структур является прямая зависимость профиля ограничивающего потенциала изучаемой системы от метода ее выращивания. При этом может возникнуть ситуация, когда в результате перемешивания изовалентных компонент низкоразмерной структуры и окружающей среды происходит сглаживание профиля ограничивающего потенциала [9]. В первом приближении такой потенциал можно аппроксимировать параболическим [10,11], рассматривая его как более реалистичный, чем прямоугольный. В связи с этим вызывает интерес рассмотрение межпримесного поглощения в параболической квантовой яме, в предположении, что одна из примесей является доминирующей.

В данной работе теоретически исследуется оптическое поглощение в параболической квантовой яме $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$, обусловленное переходами “акцептор–донор”.

2. Энергетический спектр

Для примесного гамильтониана можно записать

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_z^2}{2m^*} + \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m^*} + \frac{m^* \omega^2 z^2}{2} - \frac{e^2}{\kappa \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}}, \quad (1)$$

где m^* – эффективная масса электрона (дырки), κ – диэлектрическая проницаемость (для GaAs $\kappa = 12.9$), z_i ($i = a, d$) – расположение примеси вдоль оси OZ , ω – частота ограничивающего потенциала, определяемая с помощью вириальной теоремы согласно соотношению $\omega \ll \hbar / m^* L^2$, где L – ширина КЯ. В дальнейшем мы для точного равенства будем представлять ω в зависимости от L в виде $\omega = \gamma \hbar / m^* L^2$, где γ – некоторый подгоночный параметр, обеспечивающий точное равенство.

За начало координатной плоскости XOY выбрано расположение примеси, так как все точки нахождения примеси в плоскости КЯ эквивалентны. Мы не будем учитывать межподзонное связывание уровней примеси [12] и представим волновую функцию основного состояния системы в виде

$$\psi_0(\rho, z) = \phi_0(\rho) \chi_0(z), \quad (2)$$

где $\phi_0(\rho)$ – волновая функция, описывающая состояние системы в плоскости КЯ, а $\chi_0(z)$ описывает состояние системы вдоль оси квантования OZ .

Волновая функция $\phi_0(\rho)$ является решением двумерного уравнения Шредингера

$$\left[\frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m^*} + V_{eff}(\rho) \right] \Phi_0(\rho) = (\varepsilon - E_n) \Phi_0(\rho), \quad (3)$$

где $V_{eff}(\rho)$ – эффективный кулоновский потенциал в плоскости XOY :

$$V_{eff}(\rho) = -\frac{e^2}{\kappa} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|\chi_0|^2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} dz. \quad (4)$$

Решение уравнения (3) будем искать на основе вариационного метода. В связи с этим волновую функцию основного состояния выберем в виде

$$\Phi_0(\rho) = \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-\rho/\lambda}, \quad (5)$$

где λ – вариационный параметр.

Отметим также, что нами обсуждаются состояния с $n = 0$, т.е. для $\chi_0(z)$ можем записать

$$\chi_0(z) = \left(\frac{m^* \omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{z^2}{2a^2}}, \quad (6)$$

где $a = \sqrt{\hbar / m^* \omega}$ – осцилляторная длина.

Энергия основного состояния получается после минимизации функции

$$\varepsilon(\lambda, z_i) = E_0 + \frac{\hbar^2}{2m^* \lambda^2} - \frac{2e^2}{\kappa \lambda} \int_0^\infty x e^{-x} dx \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|\chi_0|^2 dz}{\sqrt{x^2 + \frac{4}{\lambda^2} (z - z_i)^2}}. \quad (7)$$

Вычислив интегралы, входящие в (7), сначала для случая $z_i = 0$, после преобразований для $\varepsilon(\lambda, 0)$ получим

$$\varepsilon(\lambda, 0) = \frac{\gamma \hbar^2}{2m^* L^2} + \frac{\hbar^2}{2m^* \lambda^2} - \frac{4e^2}{\kappa \lambda} \sqrt{\frac{\gamma}{\pi}} J(\lambda), \quad (8)$$

где для $J(\lambda)$ имеем

$$J(\lambda) = \frac{4}{3\gamma^2} \left(\frac{L}{\lambda} \right)^3 {}_2F_2 \left[1, 2; \frac{3}{2}, \frac{5}{2}; -\frac{L^2}{\gamma \lambda^2} \right] + \frac{\pi}{2\gamma \sqrt{\gamma}} \frac{L^2}{\lambda^2} \exp \left[-\frac{L^2}{\gamma \lambda^2} \right] {}_1F_1 \left[\frac{1}{2}; 2; -\frac{L^2}{\gamma \lambda^2} \right] - \frac{L}{\gamma \lambda}. \quad (9)$$

Здесь ${}_2F_2[a_1, b_1; a_2, b_2; x]$ – обобщенная гипергеометрическая функция, ${}_1F_1[a; b; x]$ – вырожденная гипергеометрическая функция Куммера.

Энергию связи определим как разность

$$E_{bind} = E_0 - \min_{\lambda} \varepsilon(\lambda, z_i). \quad (10)$$

3. Коэффициент поглощения

Перейдем теперь к вычислению коэффициента поглощения света, обусловленного переходами между основными уровнями донор-акцепторной пары в изучаемой структуре.

Рассмотрим слабо легированную КЯ с концентрацией доминирующей примеси n_a , когда $\bar{R} \gg a_d, a_a$ ($\bar{R}$ – среднее расстояние между донором и акцептором в плоскости КЯ). Тогда основной вклад в вероятность перехода будут давать переходы в ДАП-ах с $R \geq a_d, a_a$. В этом случае энергию взаимодействия пары можно принять равной $e^2/\kappa R$ и рассматривать ее как сдвиг энергетического уровня акцептора [8].

Волновые функции и энергии, описывающие связанные состояния электрона на акцепторе и доноре, представим в виде

$$\psi_a = \frac{1}{\lambda_a} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m_v \omega_l}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{(z-z_0)^2}{2a_l^2}} e^{-\frac{|\mathbf{p}-\mathbf{R}|}{\lambda_a}} u_{v,0}(\mathbf{p}-\mathbf{R}), \quad (11)$$

$$\psi_d = \frac{1}{\lambda_d} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m_c \omega_2}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{z^2}{2a_d^2}} e^{-\frac{\rho}{\lambda_d}} u_{c,0}(\mathbf{p}), \quad (12)$$

$$E_a = -\min \varepsilon_a(\lambda_a) - \frac{e^2}{\kappa R}, \quad (13)$$

$$E_d = \min \varepsilon_d(\lambda_d) + \varepsilon_{gap}. \quad (14)$$

где λ_a, λ_d – вариационные параметры, $u_{v,0}, u_{c,0}$ – блоховские амплитуды в центре зоны Бриллюэна (в рассматриваемой структуре экстремумы зон находятся в центре зоны Бриллюэна), ε_{gap} – ширина запрещенной зоны.

Коэффициент поглощения света определяется по формуле [13]

$$K_R(\omega) = \frac{4\pi^2 c}{n\omega V} \frac{|M_{ad}|^2}{|A_0|^2} \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \quad (15)$$

где V – объем образца, M_{ad} – матричный элемент перехода акцептор–донор, n – показатель преломления, A_0 – амплитуда векторного потенциала падающей электромагнитной волны.

Для матричного элемента можно записать

$$M_{ad} = \frac{2ec}{\pi m_0 c} (\mathbf{e} \mathbf{p}_{cv}) \frac{1}{\lambda_a \lambda_d} F(R) \xi(z_0), \quad (16)$$

где $\mathbf{p}_{cv}$ – матричный элемент, обусловленный блоховскими амплитудами, $\mathbf{e}$ – поляризация падающего света. Посредством $F(R)$ и $\xi(z_0)$ мы обозначили следующие интегралы:

$$F(R) = \int_0^{2\pi} \int_0^\infty e^{-\left(\frac{1}{\lambda_a} \sqrt{\rho^2 + R^2 - 2\rho R \cos\varphi} + \frac{1}{\lambda_d} \rho\right)} \rho d\rho d\varphi, \quad (17)$$

$$\xi(z_0) = \sqrt{\frac{\gamma}{\pi L^2}} \int_{-\infty}^\infty e^{-\gamma \frac{z_0^2}{2L^2}} e^{-\gamma \frac{(z^2 - z_0 z)}{L^2}} dz. \quad (18)$$

Как видно из (15), переходы возможны только между такими ДАП-ами, расстояние между которыми определяется из закона сохранения энергии, т.е.

$$R_l \equiv R = \frac{e^2}{\kappa(\hbar\omega - \tilde{\varepsilon}_g)}, \quad (19)$$

где

$$\tilde{\varepsilon}_g = \varepsilon_g + E_d^0 + E_a^0, \quad E_a^0 = \min_{\lambda_a} \varepsilon_a(\lambda_a), \quad E_d^0 = \min_{\lambda_d} \varepsilon_d(\lambda_d). \quad (20)$$

Считая R меняющимся непрерывно при $n_a \square n_d$, запишем выражение для спектральной плотности поглощения [8]

$$K(\omega) = N_d \int_0^\infty K_R(\omega) W(R) dR, \quad (21)$$

где N_d – число доноров, $W(R)$ – функция распределения пар по значениям R .

Возьмем в качестве функции распределения пар по R закон распределения ближайшего соседа [14], принимая, что $W(R)$ не зависит от z :

$$W(R) = 2\pi R n_a \exp\{-\pi R^2 L n_a\}. \quad (22)$$

После усреднения по (22) для коэффициента поглощения окончательно получим следующую формулу:

$$K(\omega) = \frac{2^5 \pi N n_a^- n_d^+}{L \omega \lambda_a^2 \lambda_d^2 c m_0^2} \sqrt{\frac{2\pi}{\gamma}} |\mathbf{ep}_{cv}|^2 |\xi(z_0)|^2 |F(R_l)|^2 R_l^3 \exp\{-\pi R_l^2 n_a^-\}, \quad (23)$$

где n_a^- и n_d^+ – поверхностные концентрации акцепторных и донорных примесей, соответственно.

4. Обсуждение результатов

Для численной оценки КП света использованы следующие численные значения параметров задачи для GaAs: $\varepsilon_{gap} = 1.519$ эВ, $m_v = 0.34m_e$, $m_c = 0.067m_e$, $n = 3.6$. Расчеты выполнены для концентраций доминирующей примеси (акцепторов) $n_a^- = 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и степени компенсации $k = 0.1$, что является наибольшим допустимым значением для слабого легирования. Отметим, что значение межпримесного поглощения на порядок меньше примесного поглощения при переходах “зона–примесь” и “примесь–зона” [6].

На рис.1 приведены зависимости коэффициента поглощения от частоты падающего света при постоянной степени компенсации, для различных значений концентрации доминирующей примеси ($n_a^- = 10^{10} \text{ см}^{-2}$, $n_a^- = 5 \times 10^{10} \text{ см}^{-2}$, $n_a^- = 10^{11} \text{ см}^{-2}$). Как и следовало ожидать, с уменьшением концентрации доминирующей примеси наблюдается уменьшение коэффициента поглощения. При этом частота, соответствующая пороговому значению коэффициента поглощения, незначительно уменьшается (“синее смещение”), что является следствием ослабления перекрытия волновых функций донор-акцепторной пары.

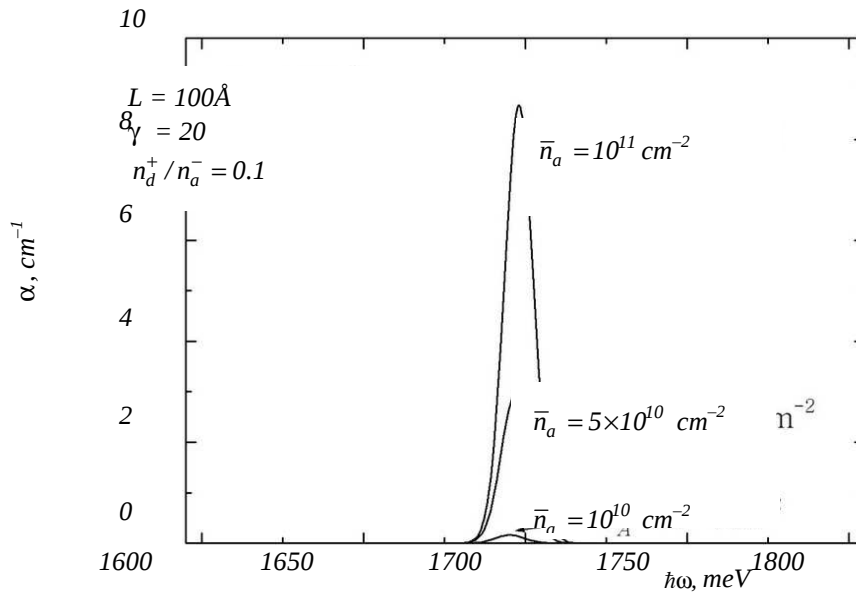


Рис.1. Зависимость коэффициента поглощения от частоты падающего света для различных концентраций доминирующей примеси при постоянной степени компенсации.

Следует отметить важную специфику межпримесных переходов, а именно: эти переходы имеют место между уровнями, относящимся к различным примесным атомам, тогда как обычно рассматриваются переходы между уровнями одного и того же атома. Именно из-за этого обстоятельства возникает необходимость усреднения КП по расстояниям ДАП, чем и объясняется концентрационное уширение кривых поглощения.

Работа выполнена в рамках Национальной программы “Полупроводниковая наноэлектроника”.

ЛИТЕРАТУРА

1. D.O.Toginho Filho, I.F.L. Dias, E.Laureto, J.L.Duarte, S.A.Laurenco, L.C.Pocas. J. Appl. Phys., **97**, 123702 (2005).
2. A.Guzman, J.L.Sanchez-Rojas, J.M.G.Tijero, J.J.Sanchez, J.Hernando, E.Calleja, E.Mufioz, G.Vergara, M.T.Montojo, L.J.Gornez, P.Rodriguez, R.Almazan, M.Verdu. IEEE Proc.-Optoelectron., **146**, 89 (1999).
3. J.Kundrotas, A.Cerskus, S.Asmontas, G.Valusis, B.Sherliker, M.P.Halsall, M.J.Steer, E.Johannessen, P.Harrison. Phys. Rev. B, **72**, 235322 (2005).
4. L.E.Oliveira, R.Perez-Alvarez. Phys. Rev. B, **40**, 10460 (1989).
5. А.М.Казарян, Э.М.Казарян. ФТП, **7**, 1383 (1977).
6. Е.М.Казарян, А.А.Костанян, Н.А.Саркисян. Physica E, **28**, 423 (2005).
7. А.А.Киракосян, Э.А.Саркисян. Изв. АН Арм. ССР, Физика, **19**, 129 (1984).
8. Э.М.Казарян, А.О.Меликян, Г.Р.Минасян. ФТП, **13**, 2034 (1979).
9. J.Barker, E.O'Railly. Physica E, **4**, 231 (1999).
10. P.A.Maksym, T.Chakraborty. Phys. Rev. Lett., **65**, 108 (1990).
11. F.M.Peeters. Phys. Rev. B, **42**, 1486 (1990).
12. G.Bastard. Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures. Les Ulis Cedex, Les Editions de Physique, 1989.
13. А.И.Ансельм. Введение в теорию полупроводников. М., Наука, 1978.
14. G.M.Duñhler. Phys. Stat. Sol. (b), **45**, 705 (1971).

ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ԿԼԱՆՈՒՄԸ ՊԱՅՄԱՆԱՎՈՐՎԱԾ
ԴՈՆՈՐ-ԱԿՑԵՊՏՈՐԱՅԻՆ ԶՈՒՅԳԵՐԻ ՄԻՋԵՎ ԱՆՑՈՒՄՆԵՐՈՎ ՊԱՐԱԲՈԼԱՅԻՆ
ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ՓՈՍՈՒՄ

Ա.Ա. ԿՈՍՏԱՆՅԱՆ

Տեսականորեն հետազոտված է միջխառնուրդային օպտիկական կլանումը պարաբոլային քվանտային փոստում: Թույլ լեգիրացման պայմանի դեպքում որոշված է ակցեպտոր-դոնոր անցումների հավանականությունը, ինչպես նաև հաշվարկված է համապատասխան կլանման գործակիցը: Հաշվի է առնված կլանման կորի լայնացումը՝ պայմանավորված միջխառնուրդային հեռավորությունների միջինացմամբ: Հետազոտված է կլանման գործակցի կախման բնույթը գերակշռող խառնուրդի կոնցենտրացիայից, ինչպես նաև կլանման սպեկտրի կապույտ շեղումը:

OPTICAL ABSORPTION CAUSED BY THE TRANSITIONS
BETWEEN DONOR-ACCEPTOR PAIRS
IN A PARABOLIC QUANTUM WELL

A.A. KOSTANYAN

The interimpurity optical absorption in a parabolic quantum well is studied theoretically. Under the assumption of a lightly doped semiconductor, the acceptor-to-donor transitions probabilities are determined, as well as the corresponding absorption coefficient is calculated. The spreading of the absorption curve as a result of averaging over impurity distances is taken into account. The dependence of the absorption coefficient on the impurity concentration is determined and the blue shift in the absorption spectrum is studied.