

УДК 621.315

ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ И СЕЧЕНИЕ ФОТОИОНИЗАЦИИ ВОДОРОДОПОДОБНОЙ ДОНОРНОЙ ПРИМЕСИ В КВАНТОВОЙ ПРОВОЛОКЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

В.Н. МУГНЕЦЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 18 апреля 2007 г.)

Изучено влияние однородного продольного магнитного поля на энергию связи и сечение фотоионизации водородоподобной донорной примеси в полупроводниковой квантовой проволоке круглого сечения, аппроксимируемой цилиндрической ямой конечной глубины, в зависимости от положения примеси. Выявлены правила отбора и найдены аналитические выражения для сечения фотоионизации в зависимости от индукции магнитного поля, расстояния примеси от оси проволоки и поляризации световой волны.

1. Введение

В последние годы наблюдается возрастающий интерес к исследованию электронных состояний водородоподобных примесей в полупроводниковых гетероструктурах (квантовые ямы, проволоки, точки) ввиду уникальных электронных и оптических свойств таких структур и развивающихся экспериментальных методов их получения [1-8]. Помимо примесей, существенное влияние на электронные и оптические свойства созданных на базе полупроводниковых гетероструктур приборов имеют внешние электрические и магнитные поля. В связи с этим изучение влияния внешних полей на энергию связи электрона с примесью, а также на сечение фотоионизации важно для выяснения физических свойств полупроводниковых гетероструктур [9-21].

Энергия связи примеси в цилиндрической квантовой проволоке (КП) GaAs, окруженной бесконечным потенциальным барьером в магнитном поле, направленном параллельно оси КП, вычислена в работе [9] вариационным методом, а в работе [10] в рамках модели потенциальной ямы конечной глубины изучено влияние магнитного поля на зависимости энергии связи $1s$ -, $2p$ -, $3p$ -подобных состояний от радиуса КП и положения примеси. В работе [11] вычислена энергия связи примеси при наличии как магнитного, так и электрического полей.

В данной работе в рамках вариационного метода рассмотрено влияние однородного магнитного поля и положения водородоподобной донорной примеси на энергию связи и сечение фотоионизации в полупроводниковой квантовой проволоке круглого сечения, аппроксимируемой цилиндрической ямой конечной глубины. Выявлены правила отбора и найдены аналитические выражения для сечения фотоионизации в зависимости от индукции

магнитного поля, расстояния примеси от оси КП и поляризации световой волны.

2. Энергия связи

Рассмотрим цилиндрическую КП с прямоугольным ограничивающим потенциалом конечной глубины в магнитном поле, направленном вдоль оси проволоки. Предположим, что донорная примесь находится в точке с координатами $(\rho_i, 0, 0)$. Такой выбор координат примеси не ограничивает общность задачи ввиду цилиндрической симметрии и макроскопической длины КП, а также однородности магнитного поля.

Гамильтониан электрона, взаимодействующего с водородоподобной примесью, имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{2}{\sqrt{z^2 + (\mathbf{t} - \mathbf{t}_i)^2}}, \quad (1)$$

где

$$\hat{H}_0 = - \left[\frac{1}{t} \frac{\partial}{\partial t} \left(t \frac{\partial}{\partial t} \right) + \frac{1}{t^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{4} \gamma^2 t^2 + v(t) \quad (2)$$

– гамильтониан электрона в отсутствие примеси, $\gamma = (a_B/l_B)^2$, $l_B = (\hbar/eB)^{1/2}$ – магнитная длина, $v(t)$ – ограничивающий потенциал КП ($v(t) = 0$ при $t \leq 0$ и $v(t) = v_0$ при $t > 0$), $\mathbf{t}_i$ – радиус-вектор примеси (все расстояния выражены в эффективных боровских радиусах a_B , а энергии – в эффективных ридбергах E_R).

Следуя вариационному принципу, волновую функцию основного примесного состояния запишем в виде

$$\psi_i(t, \varphi, z; t_i, \beta) = N \exp \left\{ -\beta \sqrt{z^2 + (\mathbf{t} - \mathbf{t}_i)^2} \right\} g_0(t), \quad (3)$$

где $(\mathbf{t} - \mathbf{t}_i)^2 = t^2 + t_i^2 - 2tt_i \cos \varphi$, β – вариационный параметр, N – постоянная нормировки,

$$g_0(t) = g_{n,l}(t) \Big|_{l=0, n=0},$$

$$g_{n,l}(t) = N_{n,l} \exp(-\gamma t^2/4) (\gamma t^2/2)^{|l|/2} \begin{cases} F(-a_{nl}, |l|+1; \gamma t^2/2), & t \leq r, \\ \frac{F(-a_{nl}, |l|+1; \gamma r^2/2)}{U(-b_{nl}, |l|+1; \gamma r^2/2)} U(-b_{nl}, |l|+1; \gamma t^2/2), & t > r, \end{cases} \quad (4)$$

– радиальная волновая функция электрона в отсутствие декорной примеси, $F(-a_{nl}, |l|+1; \gamma t^2/2)$ и $U(-b_{nl}, |l|+1; \gamma t^2/2)$ – вырожденные гипергеометрические функции, описывающие движение электрона в КП и в области барьера, соответственно, n, l – квантовые числа, $r = R/a_B$ – безразмерный радиус КП, $a_{nl} = \varepsilon_{nl}/2\gamma - (|l|+l+1)/2$, $b_{nl} = (\varepsilon_{nl} - v_0)/2\gamma - (|l|+l+1)/2$, $\varepsilon_{n,l}$ – энергия электрона в отсутствие примеси [10,14].

Энергия основного примесного состояния даётся выражением

$$\varepsilon_i = \min_{\beta} \langle \psi_i(t, \varphi, z; t_i, \beta) | \hat{H} | \psi_i(t, \varphi, z; t_i, \beta) \rangle, \quad (5)$$

где $\min_{\beta} f$ означает минимальное по β значение функции f [10], а энергию связи определим как $\varepsilon_b = \varepsilon_0 - \varepsilon_i$, где ε_0 – собственное значение оператора $\hat{H}_0$.

3. Сечение фотоионизации

Выражение для сечения фотоионизации, описывающее переход электрона из основного примесного состояния $|\psi_i\rangle$ в конечное состояние $|\psi_f\rangle$ в дипольном приближении имеет вид [15]

$$\sigma(\hbar\omega) = \frac{4\pi^2\alpha\hbar\omega}{n} \left(\frac{E_{\text{eff}}}{E_0} \right)^2 \left(\frac{m}{m_0} \right)^2 \sum_f \left| \langle \psi_i | \zeta \mathbf{r} | \psi_f \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \quad (6)$$

где $\alpha = e^2 / \hbar c$ – постоянная тонкой структуры, $\hbar\omega$ – энергия фотона, n – показатель преломления системы, E_{eff} – эффективное электрическое поле на примеси, E_0 – среднее поле, ζ – вектор поляризации падающего излучения, m_0 – масса свободного электрона, E_f и E_i – энергии конечного и начального состояний, соответственно.

Рассмотрим случаи, когда вектор поляризации падающего излучения направлен по оси z (случай параллельной поляризации) и по оси x , на которой находится примесь (случай перпендикулярной поляризации). В рассматриваемом ниже случае равенства нулю азимутального квантового числа конечного состояния l переходы под влиянием поляризованного по оси y излучения запрещены.

Волновую функцию конечного состояния можно представить в виде

$$\psi_f(t, \varphi, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} e^{i(l\varphi + kz)} g_{nl}(t), \quad (7)$$

где L – длина проволоки, $k = Ka_B$, K – волновое число.

После подстановки (3) и (7) в (6) и последующего интегрирования по волновому числу k , для сечения фотоионизации при переходах из примесного состояния в первую подзону получим:

$$\sigma(\Omega) = \sigma_0 |M_{i,k_0=\sqrt{\Omega-\varepsilon_b}}|^2 \frac{\Omega}{\sqrt{\Omega-\varepsilon_b}} \theta(\Omega-\varepsilon_b), \quad (8)$$

где

$$\sigma_0 = \frac{\pi\alpha a_B^2}{n} \left(\frac{m}{m_0} \right)^2 \left(\frac{E_{\text{eff}}}{E_0} \right)^2, \quad (9)$$

$$M_{i,k} = \begin{cases} N(a_B^5/\pi)^{1/2} \int_0^\infty T_{\square}(t_i, \beta, k; t) g_0(t)^2 t dt, & \zeta \square z, \\ N(a_B^5/\pi)^{1/2} \int_0^\infty T_{\perp}(t_i, \beta, k; t) g_0(t)^2 t^2 dt, & \zeta \square x \end{cases} \quad (10)$$

– матричный элемент перехода,

$$T_{\square}(t_i, \beta, k; t) = -4i \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} e^{-\beta \sqrt{z^2 + (t-t_i)^2}} \sin(kz) z dz d\varphi =$$

$$= -2i\beta k \int_0^{\pi} \tau (2K_1(\tau) + \tau [K_0(\tau) + K_2(\tau)]) d\varphi, \quad (11)$$

$$T_{\perp}(t_i, \beta, k; t) = 4 \int_0^{\pi} \cos \varphi \int_0^{\infty} e^{-\beta \sqrt{z^2 + (t-t_i)^2}} \cos(kz) dz d\varphi = 4\beta(\beta^2 + k^2) \int_0^{\pi} \tau K_1(\tau) \cos \varphi d\varphi, \quad (12)$$

$\tau = |\mathbf{t} - \mathbf{t}_i| \sqrt{\beta^2 + k^2}$, $\Omega = \hbar\omega / E_R$, $K_\nu(\tau)$ – функция Макдональда порядка ν [22].

4. Обсуждение

Численные расчеты проведены для системы GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs, со значениями параметров $m = 0.067m_0$, $n = 3.3$, $E_R = 5.2$ мэВ, $a_B = 104$ Å, $v_0 = 50$ (концентрация сплава $x \approx 0.35$) [23]. Считается, что $E_{\text{eff}} \cong E_0$ [24].

На рис.1 представлены зависимости энергии связи электрона от индукции магнитного поля (параметра γ) для различных значений радиуса КП и расстояния примеси от её оси. При фиксированном положении примеси, с ростом индукции магнитного поля энергия связи претерпевает существенные изменения в проволоке с большим радиусом, ввиду уменьшения роли размерного квантования при увеличении радиуса КП и, тем самым, возрастания роли магнитного квантования. При больших значениях индукции магнитного поля энергии связи, соответствующие радиусам проволоки $R = a_B$ и $R = 2a_B$, совпадают, что обусловлено локализацией электрона сильным магнитным полем в приосевой области, вследствие чего он практически не чувствует влияние ограничивающего потенциала. Заметим также, что скорость изменения энергии связи максимальна в случае расположения примеси на оси проволоки ($t_i = 0$), поскольку положение максимума плотности электронного облака совпадает с положением примеси. Возрастание энергии связи при $t_i \leq 0.5$ сменяется её уменьшением для значений $t_i > 0.5$. Для промежуточных значений t_i эта зависимость немонотонна, что является следствием двух конкурирующих факторов: (а) смещения электронного облака из области $t > t_i$ в область $t \leq t_i$ с увеличением γ , чем обусловлено усиление кулоновского взаимодействия электрона с примесью и, соответственно, увеличение энергии связи, и (б) уменьшения плотности вероятности нахождения электрона вблизи примеси с увеличением γ , что приводит к уменьшению энергии связи.

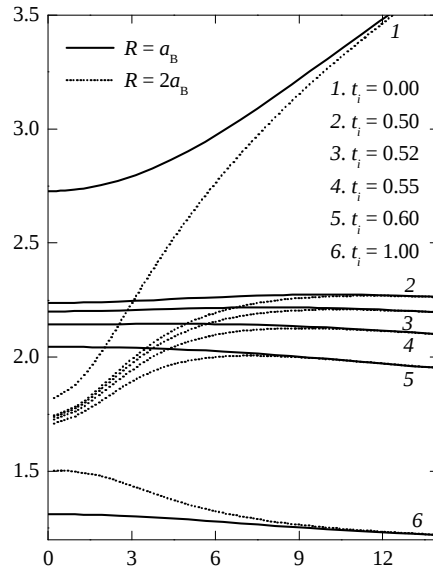


Рис.1. Зависимость энергии связи от индукции магнитного поля для различных значений положения примеси и радиуса КП.

На рис.2 показана зависимость квадрата модуля безразмерного матричного элемента, соответствующего переходам с основного примесного состояния в первую подзону, от γ , что определяет вероятность перехода электрона из начального в конечное состояние с энергией $\epsilon_f = \epsilon_i + \Omega = \epsilon_i + \epsilon_b + k^2$ под влиянием кванта излучения с фиксированной энергией Ω . Удаление примеси от оси КП приводит к уменьшению матричного элемента вследствие уменьшения степени перекрытия волновых функций начального и конечного состояний с увеличением t_i . Для значений $t_i = 0$ и $t_i = 0.5$, при $\Omega = 3.5$ и 4 зависимость квадрата модуля матричного элемента от индукции магнитного поля немонотонна. Такое поведение $|M_{i,k}|^2$ обусловлено увеличением энергии связи с усилением поля при $t_i = 0$, вследствие чего при фиксированной Ω волновое число конечного состояния k уменьшается. В случае параллельной поляризации оператор взаимодействия излучения с электроном пропорционален z , и интеграл перекрытия отличается от нуля из-за наличия нечетной части волновой функции конечного состояния (см. (11)). Вышеупомянутое уменьшение k сначала способствует увеличению интеграла перекрытия (из-за уменьшения числа осцилляций волновой функции конечного состояния в области, где волновая функция начального состояния отлична от нуля). Однако при малых значениях k интеграл перекрытия уменьшается, достигая нуля при значении $k = 0$, чему соответствует $\epsilon_b = \Omega$. При $t_i \neq 0$ к вышеупомянутым эффектам добавляется также немонотонный характер зависимости энергии связи от γ . При $t_i = 1$ энергия связи уменьшается, а k увеличивается, приводя к уменьшению матричного элемента.

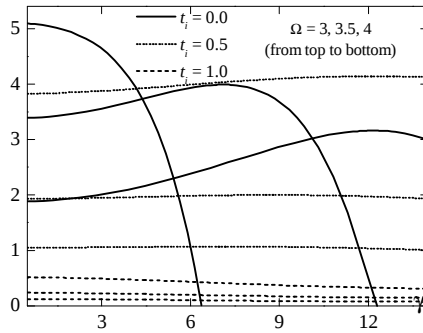


Рис.2. Зависимость квадрата модуля матричного элемента от магнитного поля в случае параллельной поляризации.

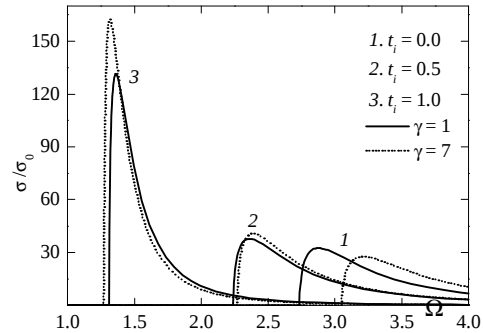


Рис.3. Зависимость сечения фотоионизации от частоты падающего излучения в случае параллельной поляризации.

На рис.3 представлены зависимости сечения фотоионизации от частоты падающего излучения для различных значений радиуса-вектора примеси и индукции магнитного поля в случае параллельной поляризации. Видно, что пороговая энергия фотоионизации, совпадающая с энергией связи, уменьшается с увеличением расстояния примеси от оси КП. Увеличение индукции магнитного поля приводит к увеличению пороговой энергии при значениях $t_i = 0$ и $t_i = 0.5$ и к ее понижению при $t_i = 1$. Можно также заметить, что магнитное поле оказывает наибольшее влияние на порог фотоионизации при $t_i = 0$. Эти результаты находятся в соответствии с приведенными на рис.1 данными.

Увеличение энергии Ω , если она не очень близка к ϵ_b , приводит к уменьшению сечения фотоионизации, так как разница между частотой падающего излучения и пороговой частотой увеличивается (см. (8)). При этом, чем больше значение пороговой частоты, тем слабее зависимость σ от Ω вследствие увеличения сечения фотоионизации при увеличении энергии падающего фотона Ω , для фиксированного значения разности $\Omega - \epsilon_b$.

Важной особенностью сечения фотоионизации в случае параллельной поляризации является наличие максимума. Как уже отмечалось, уменьшение k из-за уменьшения Ω приводит к уменьшению матричного элемента до нуля. С другой стороны, уменьшение Ω приводит к возрастанию σ при значениях Ω , не очень близких к ϵ_b . При этом, чем больше t_i , тем слабее зависимость матричного элемента от k , что приводит к повышению пика сечения фотоионизации.

На рис.4 и 5 представлены зависимости матричного элемента от u и сечения фотоионизации от Ω для переходов с основного примесного состояния в первую подзону в случае перпендикулярной поляризации падающего излучения (x -поляризация). Как и в случае параллельной поляризации, в начальном и конечном состояниях квантовое число $l = 0$. В случае перпендикулярной поляризации, при $t_i = 0$ такие переходы запрещены [24]. Они запрещены также при $t_i \neq 0$ в случае y -поляризации света.

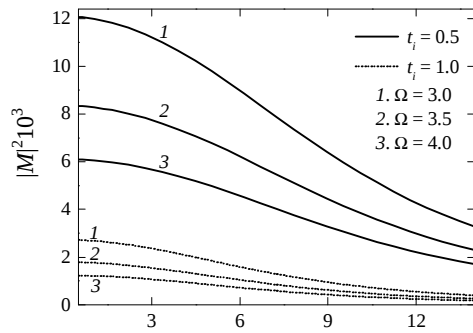


Рис.4. Зависимость квадрата модуля матричного элемента от магнитного поля в случае перпендикулярной поляризации.

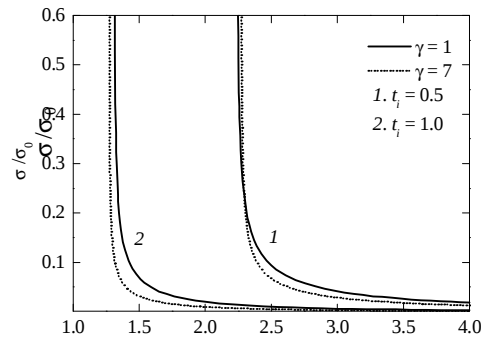


Рис.5. Зависимость сечения фотоионизации от частоты падающего излучения в случае перпендикулярной поляризации.

Как видно из рис.4, квадрат модуля матричного элемента приблизительно на три порядка меньше, чем в случае параллельной поляризации, так как область поперечной локализации волновой функции начального состояния, а, следовательно, и интенсивность взаимодействия электрона с излучением значительно меньше, чем в направлении оси КП [10]. Отметим также, что увеличение как расстояния примеси от оси КП, так и индукции магнитного поля приводят к уменьшению матричного элемента вследствие уменьшения интеграла перекрытия в плоскости, перпендикулярной оси z .

Из рис.5 видно, что сечение фотоионизации расходится при $\Omega = \epsilon_b$. Это объясняется тем, что оператор взаимодействия излучения с электроном в случае перпендикулярной поляризации не зависит от z , вследствие чего интеграл перекрытия по z отличается от нуля из-за наличия чётной части волновой функции конечного состояния. При стремлении Ω к ϵ_b (т.е. при $k \rightarrow 0$) матричный элемент остается отличным от нуля, что и приводит к сингулярности σ вследствие уменьшения разности $\Omega - \epsilon_b$.

Выражаю благодарность проф. А.А. Киракосяну за обсуждение результатов работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. C.A.Duque, A.Montes, A.L.Morales, N.Porrás-Montenegro. J. Phys.: Cond. Matter, **9**, 5977 (1997).
2. M.El-Said, M.Tomak. J. Phys. Chem. Solids, **52**, 603 (1991).
3. M.El-Said, M.Tomak. Solid State Commun., **82**, 721 (1992).
4. K.F.Haiwi, M.El-Said. Phys. stat. sol. (b), **187**, 93 (1995).
5. A.Sali, M.Fliyou, H.Loumrhari. J. Phys. Chem. Solids, **59**, 625 (1998).
6. A.Sali, M.Fliyou, L.Roubi, H.Loumrhari. J. Phys.: Cond. Matter, **11**, 2427 (1999).
7. A. Sali, M.Fliyou, H.Satori, H.Loumrhari. Phys. stat. sol. (b), **211**, 661 (1999).
8. A.Sali, M.Fliyou, H.Satori, H.Loumrhari. J. Phys. Chem. Solids, **64**, 31 (2003).
9. E.Niculescu, A.Gearba, G.Cone, C.Negutu. Superlatt. Microst., **29**, 319 (2001).
10. P.Villamil, C.Cabra, N.Porrás-Montenegro. J. Phys. C, **17**, 5049 (2005).
11. I.Erdogan, O.Akankan, H.Akbas. Physica E, **33**, 83 (2006).
12. E.Kaspoglu, H.Sari, I.Suikmen. Appl. Phys. A, **78**, 1053 (2004).
13. S.V.Branis, G.Li, K.Bajaj. Phys. Rev. B, **47**, 1316 (1993).
14. S.Aktas, F.K.Boz, S.S.Dalgic. Physica E, **28**, 96 (2005).

15. **G.Lamouche, Y.Lepin.** Phys. Rev. B., **49**, 13452 (1994).
16. **A.Montes, C.A.Duque, N.Porras-Montenegro.** Phys. stat. sol. (b), **210**, 731 (1998).
17. **O.Akankan, S.E.Okan, H.Akbas.** Physica E, **25**, 535 (2005).
18. **S.Aktas, S.E.Okan, H.Akbas.** Superlatt. Microst., **30**, 129 (2001).
19. **Sr.G.Jayam, K.Navaneethakrishnan.** Solid State Commun., **122**, 433 (2002).
20. **J.D.Correa, N.Porras-Montenegro, C.A. Duque.** Brazilian J. Phys., **36**, 387 (2006).
21. **H.A.Sarkisyan.** Modern Phys. Lett. B, **16**, 835 (2002).
22. **M.Abramowitz, I.A.Stegun.** Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables. Washington D. C., 1964.
23. **S.Adachi.** J. Appl. Phys., **53**, R1 (1985).
24. **B.K.Ridley.** Quantum Processes in Semiconductors. Oxford, Clarendon Press, 1982.

ՋՐԱԾՆԱՆՄԱՆ ԴՈՆՈՐԱՅԻՆ ԽԱՌՆՈՒՐԴԻ ԿԱՊԻ ԷՆԵՐԳԻԱՆ
ԵՎ ՖՈՏՈՆՈՆԱՅՄԱՆ ԿՏՐՎԱԾՔԸ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԼԱՐՈՒՄ
ՄԱԳՆԻՏԱԿԱՆ ԴԱՇՏՈՒՄ

Վ.Ն. ՄՈՒՂՆԵՅՅԱՆ

Աշխատանքում ուսումնասիրված է համասեռ, երկայնական մագնիսական դաշտի ազդեցությունը վերջավոր խորությամբ գլանային փոսով մոտարկված շրջանաձև կտրվածքով կիսահաղորդչային քվանտային լարում ջրածնանման դոնորային խառնուրդի կապի էներգիայի և ֆոտոիոնացման կտրվածքի վրա: Ստացված են ջոկման կանոններ, ինչպես նաև մագնիսական դաշտի ինդուկցիայից, խառնուրդի դիրքից և լուսային ալիքի բևեռացումից ֆոտոիոնացման կտրվածքի կախման վերլուծական արտահայտություններ:

BINDING ENERGY AND PHOTOIONIZATION CROSS-SECTION
OF A HYDROGEN-LIKE DONOR IMPURITY
IN A QUANTUM WELL-WIRE IN A MAGNETIC FIELD

V.N. MUGHNETSYAN

The effect of a uniform longitudinal magnetic field on the binding energy and photoionization cross-section of a hydrogen-like donor impurity is studied for a semiconductor quantum well-wire approximated by a cylindrical well of finite depth. The selection rules and analytical expressions for the photoionization cross-section are obtained depending on the magnetic field induction, impurity position and light wave polarization.