

УДК 537.311

ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ И СЕЧЕНИЕ ФОТОИОНИЗАЦИИ ВОДОРОДОПОДОБНОЙ ДОНОРНОЙ ПРИМЕСИ В КВАНТОВОЙ ЯМЕ ПЁШЛЯ–ТЕЛЛЕРА

А. ХАКИМИФАРД

Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 17 июля 2009 г.)

Исследовано влияние положения водородоподобной донорной примеси и формы ограничивающего яму потенциала на энергию связи и сечение фотоионизации донорной примеси в полупроводниковой квантовой яме с потенциалом Пёшля–Теллера. Найдено аналитическое выражение для сечения фотоионизации в случае, когда вектор поляризации падающего излучения направлен вдоль оси размерного квантования. Показано, что сечение фотоионизации имеет пороговый характер.

1. Введение

Интерес к исследованию электронных состояний водородоподобных примесей в полупроводниковых гетероструктурах – квантовых ямах (КЯ), квантовых проволоках, квантовых точках, обусловлен их уникальными физическими свойствами [1,2]. Электронные и оптические свойства примесей в низкоразмерных полупроводниковых структурах в отсутствие внешних полей исследованы во многих работах (см., например, [3-9]).

С точки зрения прикладной физики большое значение имеют оптические характеристики примесных состояний, такие, как сечение фотоионизации и коэффициент поглощения [10-12]. В работах [13] и [14] вычислено сечение фотоионизации при переходах из основного состояния водородоподобной донорной примеси в подзону КЯ с бесконечным и конечным прямоугольным потенциалами, соответственно, и показано, что для поляризованной вдоль направления оси размерного квантования волны переходы из основного примесного состояния в первую подзону КЯ запрещены, в то время как для перпендикулярно поляризованной волны эти переходы разрешены.

В данной работе в рамках вариационного метода вычислены энергия связи и сечение фотоионизации примесного центра в полупроводниковой квантовой яме с потенциалом Пёшля–Теллера. Показано, что сечение фотоионизации имеет пороговый характер. Исследовано также влияние положения водородоподобной донорной примеси и асимметричности ограничивающего яму потенциала на энергию связи и сечение фотоионизации.

2. Теория

Гамильтониан электрона в рассматриваемой системе имеет вид

$$\hat{H} = -(\hbar^2/2m)\nabla^2 - (e^2/\epsilon r) + V(z), \quad (1)$$

где m – эффективная масса электрона, ϵ – диэлектрическая проницаемость диэлектрически однородной системы, $r = [\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}$ – расстояние между электроном и примесным центром с координатами $(0, 0, z_i)$, $V(z)$ – ограничивающий потенциал Пёшля–Теллера [15]:

$$V(z) = \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} \left(\frac{\chi(\chi-1)}{\sin^2 \beta z} + \frac{\lambda(\lambda-1)}{\cos^2 \beta z} \right), \quad (2)$$

где λ и χ – параметры потенциала, $\beta = \pi/2L$, L – характеристическая ширина КЯ. При $\lambda = \chi$ потенциал (2) симметричен относительно прямой $\beta z = \pi/4$, а при $\lambda \neq \chi$ появляется асимметричность, которой можно управлять изменением указанных параметров.

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

$$\Psi_i(r, \alpha) = N_i \Phi(z) \exp(-\alpha r), \quad (3)$$

где α – вариационный параметр, N_i – постоянная нормировки, $\Phi(z)$ – волновая функция электрона в отсутствие примеси [15].

Энергия основного примесного состояния дается выражением

$$E_i = \langle \Psi_i(r, \alpha_{\min}) | \hat{H} | \Psi_i(r, \alpha_{\min}) \rangle, \quad (4)$$

где α_{\min} – значение вариационного параметра, которому соответствует минимальное значение энергии основного примесного состояния. Энергию связи определим как $E_b = E_0 - E_i$, где E_0 – собственное значение гамильтониана в отсутствие примеси.

Выражение для сечения фотоионизации, обусловленной переходами электрона из основного примесного состояния $|\psi_i\rangle$ в конечное состояние $|\psi_f\rangle$ под действием электромагнитной волны, в дипольном приближении имеет следующий вид [12]:

$$\sigma(\hbar\omega) = \frac{4\pi^2 \alpha_{FS} \hbar\omega}{\epsilon^{1/2}} \left(\frac{F_{eff}}{F_0} \right)^2 \left(\frac{m}{m_0} \right)^2 \sum_f |\langle \psi_i | \zeta \mathbf{r} | \psi_f \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \quad (5)$$

где $\alpha_{FS} = e^2/\hbar c$ – постоянная тонкой структуры, $\hbar\omega$ – энергия фотона, F_{eff} – эффективное электрическое поле волны на примеси, F_0 – среднее поле, ζ – вектор поляризации волны, m_0 – масса свободного электрона, E_f и E_i – энергии конечного и начального состояний, соответственно.

Рассмотрим случай, когда вектор поляризации направлен по оси z . Важно отметить, что в случаях бесконечного и конечного симметричного

потенциалов, для рассматриваемой поляризации переходы из основного примесного состояния в основную подзону КЯ запрещены [13,14]. Однако в случае потенциала Пёшля–Теллера эти переходы разрешены.

После подстановки волновых функций конечного и начального состояний в (5) и последующего интегрирования по двумерному волновому вектору, для сечения фотоионизации при переходах из примесного состояния в первую подзону получим следующее выражение:

$$\sigma(\hbar\omega) = \frac{8\pi^2 \alpha_{FS} m}{\varepsilon^{1/2} \hbar^2} \left(\frac{F_{eff}}{F_0} \right)^2 \left(\frac{m}{m_0} \right)^2 \frac{\alpha^2 f^2 (\hbar\omega - E_b) \hbar\omega}{\left(\alpha^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_b) \right)^{3/2}} \theta(\hbar\omega - E_b), \quad (6)$$

где

$$f(\hbar\omega - E_b) = N_i N_f \int_0^{\frac{\pi}{2B}} z |z - z_i|^{\frac{3}{2}} |\Phi(z)|^2 K_{\frac{3}{2}} \left(|z - z_i| \sqrt{\alpha^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_b)} \right) dz, \quad (7)$$

N_f – постоянная нормировки волновой функции конечного состояния, $K_n(x)$ – модифицированная функция Бесселя первого рода. [16].

3. Обсуждение

Численные расчеты проведены для системы GaAs со значениями параметров $m = 0.0632m_0$, $\varepsilon = 12.6545$ [17] и в предположении, что $F_{eff} \cong F_0$ [12].

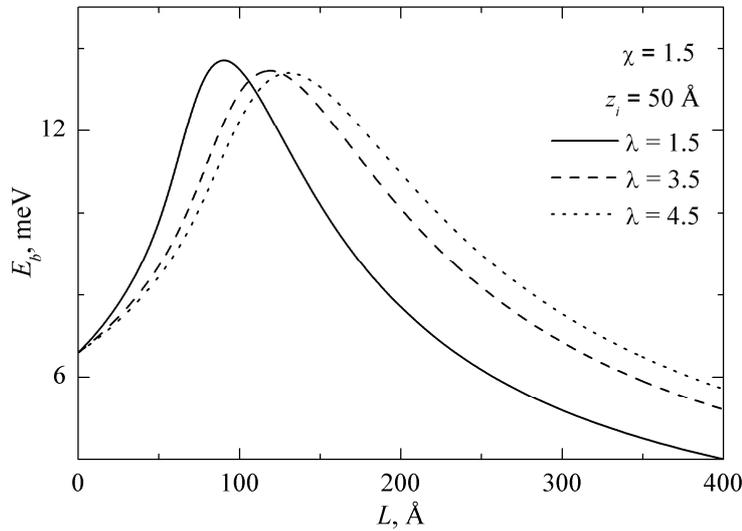


Рис.1. Зависимость энергии связи от ширины КЯ для различных значений параметра λ .

На рис.1 представлена зависимость энергии связи электрона от ширины

КЯ для различных значений параметра λ при фиксированных значениях χ и положения примеси z_i . Как видно из рисунка, при $L \rightarrow 0$ значения энергии связи для различных значений параметра λ одинаковы, что соответствует энергии взаимодействия двумерного электрона с примесью с координатой $z_i = 50 \text{ \AA}$. При увеличении ширины КЯ энергия связи увеличивается, поскольку с уширением КЯ область локализации электрона перемещается в сторону примеси, что приводит к росту энергии связи. Однако дальнейшее увеличение L приводит к расширению области локализации электрона, который в среднем удаляется от примеси, и энергия связи уменьшается. Следует отметить, что увеличение параметра λ приводит к смещению положения минимума потенциала влево. При малых значениях L (например, при $L = 50 \text{ \AA}$) увеличение параметра λ приводит к смещению максимума плотности вероятности нахождения электрона $|\Phi(z)|^2$ от примеси, вследствие чего энергия связи уменьшается. При больших же значениях L (например, при $L = 400 \text{ \AA}$) увеличение параметра λ приводит к смещению максимума плотности вероятности в сторону примеси и, как следствие, к увеличению энергии связи.

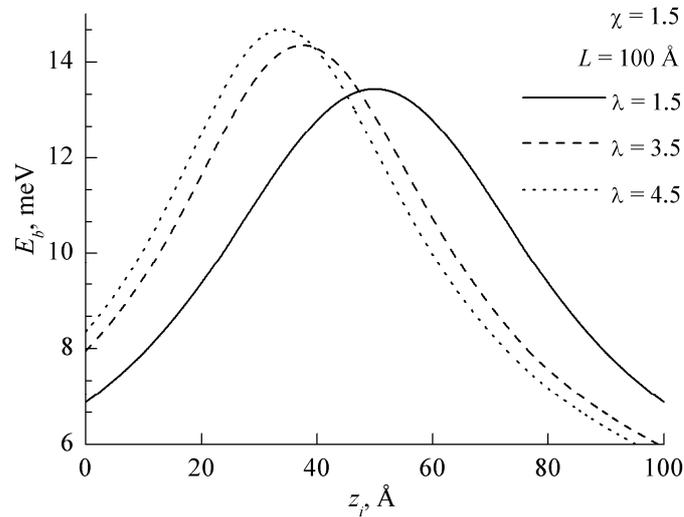


Рис.2. Зависимость энергии связи от положения примеси для различных значений параметра λ .

На рис.2 представлена зависимость энергии связи электрона от положения примеси для различных значений параметра λ при фиксированных значениях параметра χ и ширины КЯ. При смещении примеси от центра КЯ ($z_i = L/2 = 50 \text{ \AA}$) электрон–примесное взаимодействие ослабляется, и энергия связи уменьшается. Из рисунка также видно, что с увеличением параметра λ положение максимума плотности вероятности нахождения электрона у примеси смещается влево от центра КЯ. Это обстоятельство приводит к усилению локализации электрона вблизи примеси и, как следствие, к увеличению энергии связи.

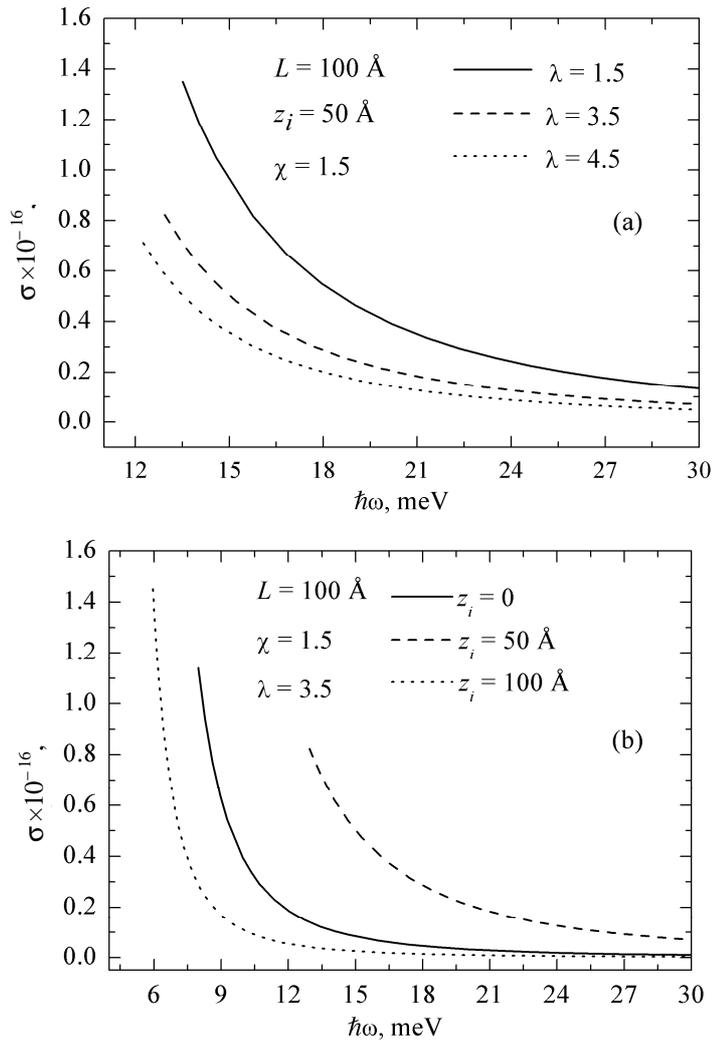


Рис.3. Зависимость сечения фотоионизации от энергии кванта падающего излучения.

На рис.3 представлена зависимость сечения фотоионизации примеси от энергии кванта падающего излучения. Сечение фотоионизации имеет пороговый характер, т.е. переходы имеют место только в случае, когда энергия кванта излучения больше энергии связи: $\hbar\omega \geq E_b$. Из рис.3а видно, что с увеличением параметра λ (при $L=100 \text{ \AA}$ и $z_i = 50 \text{ \AA}$) порог фотоионизации уменьшается, так как увеличение параметра λ приводит к уменьшению энергии связи (см. рис.1). Из рис.3а видно также, что при фиксированном значении энергии кванта падающего излучения сечение фотоионизации уменьшается. Это обусловлено тем, что в рассматриваемом случае вероятность переходов больше для малых значений параметра λ . Согласно рис.3б, пороговое значение фотоионизации для $z_i = 50 \text{ \AA}$ больше, а для $z_i = 100 \text{ \AA}$ меньше порогового

значения сечения фотоионизации в случае примеси, находящейся в центре КЯ. Такое поведение сечения обусловлено тем, что при значениях параметров $\chi = 1.5$, $\lambda = 3.5$ ограничивающий потенциал асимметричен, и, следовательно, зависимости энергии связи от положения примеси проявляют различные поведения.

Автор выражает благодарность проф. А.А. Киракосяну и М.Г. Барсегяну за помощь, оказанную при выполнении данной работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. **G.Bastard.** Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructure. Les Ulis Cedex, France, 1998.
2. **В.Н.Драгунов и др.** Основы нанoeлектроники. НГТУ, Новосибирск, 2004.
3. **G.Bryant.** Phys. Rev. B, **31**, 7812 (1985).
4. **J.Brown, H.Spector.** J. Appl. Phys., **59**, 1179 (1986).
5. **G.Weber, P.Schulz, L.Oliveira.** Phys. Rev. B, **38**, 2179 (1988).
6. **N.Porras-Montenegro, J.Lopez-Gondar, L.Oliveira.** Phys. Rev. B, **43**, 1824 (1991).
7. **A.Latge, M. de Dios-Leyva, L.Oliveira.** Phys. Rev. B, **49**, 10450 (1994).
8. **E.Kasapoglu, H.Sari, I.Sökmen.** Physica E, **19**, 332 (2003).
9. **E.Kazaryan, A.Kostanyan, H.Sarkisyan.** Physica E, **28**, 423 (2005).
10. **A.Sali, M.Fliyou, H.Loumrhari.** Physica B, **233**, 196 (1997).
11. **J.Correa, O.Cepeda-Giraldo, et al.** Phys. stat. sol. (b), **241**, 3311 (2004).
12. **V.N.Mughnetsyan, M.G.Barseghyan, A.A.Kirakosyan,** Superlattices and Microstructures, **44**, 86 (2008).
13. **M.El-Said, M.Tomak.** J. Phys. Chem. Solids, **52**, 603 (1991).
14. **K.F.Ilaiwi, M.El-Said.** Phys. stat. sol. (b), **187**, 93 (1995).
15. **З.Флюгге.** Задачи по квантовой механике, т.1, М., Мир, 1974.
16. **M.Abramowitz, I.A.Stegun.** Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables. Washington D.C., 1964.
17. **A.M.Elabsy.** J. Phys.: Condens. Matter, **6**, 10025 (1994).

ՋՐԱԾՆԱՆՄԱՆ ԽԱՌՆՈՒՐԴԻ ԿԱՊԻ ԷՆԵՐԳԻԱՆ ԵՎ ՖՈՏՈՒՈՆԱՑՄԱՆ
ԿՏՐՎԱԾՔԸ ՊՅՈՇԼ-ԹԵԼԵՐԻ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ՓՈՍՈՒՄ

Ա. ՀԱԿԻՄԻՖԱՐԴ

Ուսումնասիրված է ջրածնանման խառնուրդի դիրքի և փոսը սահմանափակող պոտենցիալի ազդեցությունը կապի էներգիայի և դոնորային խառնուրդի ֆոտոիոնացման կտրվածքի վրա Պյոշլ-Թելերի պոտենցիալով կիսահաղորդչային քվանտային փոսում: Ֆոտոիոնացման կտրվածքի համար ստացվել է վերլուծական արտահայտություն այն դեպքում, երբ լույսի ալիքի բնեռացման վեկտորն ուղղված է չափային քվանտացման ուղղությամբ: Ցույց է տրվել, որ ֆոտոիոնացման կտրվածքն ունի շեմային բնույթ:

BINDING ENERGY AND PHOTOIONIZATION CROSS-SECTION
OF HYDROGEN-LIKE IMPURITY IN A PÖSCHL-TELLER QUANTUM WELL

A. HAKIMIFARD

The effect of the donor impurity position and the form of confining potential on the binding energy and the photoionization cross-section in a semiconductor quantum well with Pöschl-Teller

potential is investigated. An analytical expression for the photoionization cross-section is obtained for the case when the polarization vector of light wave is directed along the direction of size quantization. It is shown that the photoionization cross-section has a threshold behavior.