

УДК 621.315

СПЕКТР ПОГЛОЩЕНИЯ ВОДОРОДОПОДОБНОЙ ДОНОРНОЙ ПРИМЕСИ В КВАНТОВОЙ ЯМЕ GaAs С МОДИФИЦИРОВАННЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ ПЕШЛЯ-ТЕЛЛЕРА

Т.А. САРГСЯН

Российско–Армянский университет, Ереван, Армения

e-mail: sargtigran97@gmail.com

(Поступила в редакцию 5 февраля 2019 г.)

Рассмотрены водородоподобные донорные примесные состояния в квантовой яме с модифицированным ограничивающим потенциалом Пешля-Теллера. Выявлена зависимость энергии связи от положения водородоподобной донорной примеси и параметров ограничивающего потенциала. Показано, что зависимость энергии связи от положения водородоподобной донорной примеси имеет колоколообразный характер. Существование максимума энергии связи объясняется конкуренцией эффекта размерного квантования и кулоновского взаимодействия между электроном и водородоподобной донорной примесью. Рассчитан коэффициент оптического поглощения в присутствии водородоподобного донорного примесного центра. Получены спектры поглощения для квантовых переходов между основным водородоподобным донорным примесным состоянием и основным состоянием зоны проводимости.

1. Введение

Как известно, бурное развитие полупроводниковой наноэлектроники привело к тому, что на сегодняшний день возможна экспериментальная реализация полупроводниковых квантовых наноструктур различных размерностей, геометрии и типов. Например, можно выращивать квантовые ямы, нити и точки с наперед заданными геометрическими размерами и формами [1– 4]. Во время роста конкретно взятого образца, из-за диффузии, которая происходит между образцом и окружающей средой, между ними всегда возникает ограничивающий потенциал [5]. Для теоретического моделирования физических процессов, происходящих в полупроводниковых наноструктурах, нужно задать математический вид возникающего ограничивающего потенциала. В связи с этим, очень важно уметь правильно аппроксимировать возникающий ограничивающий потенциал $U_{\text{conf}}(z)$ на границе перехода конкретно взятого образца.

Наиболее распространенными моделями аппроксимации ограничивающего потенциала являются: бесконечно глубокий потенциал, потенциал конечной глубины, параболический потенциал, модифицированный потенциал Пешля-Теллера, потенциал Морса, Кратцера и т.д. [6–15]. Чаще всего, во время роста реальных структур, из-за диффузии возникает симметричный ограничивающий потенциал, который, в большинстве случаев, с большой точностью аппроксимируется параболическим потенциалом. Причем, следует учесть, что идеальная параболическая аппроксимация хорошо применяется при сравнительно низких уровнях размерного квантования [6,7]. Задача примесного поглощения в параболической квантовой яме (КЯ) была в подробностях рассмотрена в работе [16].

Но, с другой стороны, для низких уровней энергии носителей заряда, модифицированный потенциал Пешля-Теллера хорошо аппроксимируется параболическим потенциалом, что дает возможность максимально приблизить рассматриваемую нами модель к реальной [9,11]. Одно из преимуществ данного потенциала над параболическим состоит в том, что в модели с модифицированным ограничивающим потенциалом Пешля-Теллера возможно рассматривать выброс электрона из ямы, что невозможно в случае параболического потенциала, так как стенки последнего непроницаемы (см. Рис.1).

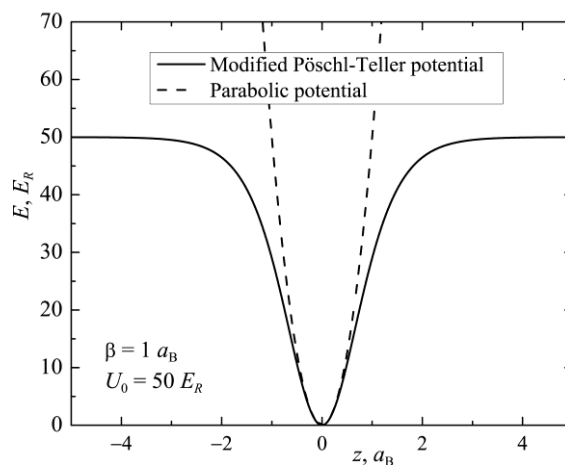


Рис.1. Сравнение параболического потенциала и модифицированного потенциала Пешля-Теллера. Параметры параболического потенциала получены разложением модифицированного потенциала Пешля-Теллера в ряд.

При рассмотрении оптических переходов в КЯ требуется учитывать влияние ряда эффектов, например, наличие примесных центров, которое оказывает значительное влияние на оптические характеристики квантовой ямы. Необходимо также отметить, что важную роль при межподзонам поглощении играет

вектор поляризации падающей волны: при экспериментальных исследованиях нельзя использовать простейшую геометрию опыта, то есть, когда волновой вектор света направлен вдоль оси роста структуры. На практике используется либо конфигурация Брюстера, либо многопроходная геометрия [18], причем в обоих случаях падающая волна распространяется под углом к оси роста структуры. При этом нормальными волнами являются волны s - и p -поляризации. Если рассматривать волны s -поляризации, то проекция вектора напряженности электрического поля на ось z $e_z = 0$ при любом φ . Следовательно, используя только волну p -поляризации, представляется возможным возбудить межподзонные оптические переходы, так как она обладает отличной от нуля $e_z = \sin \varphi$.

В связи с вышесказанным, исследование водородоподобных донорных примесных состояний и оптического поглощения в КЯ с модифицированным потенциалом Пешля-Теллера является актуальной и интересной проблемой. Настоящая статья посвящена исследованию водородоподобных донорных примесных состояний и примесного поглощения в квантовой яме с модифицированным потенциалом Пешля-Теллера. В частности, рассматривается межподзонный переход от основного уровня донорной примеси к первому уровню зоны проводимости.

2. Примесные состояния

В приближении эффективной массы гамильтониан системы в цилиндрических координатах имеет следующий вид:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V_{\text{int}}(\rho, z) + U_{\text{conf}}(z) \right] \Psi(\rho, \varphi, z) = E \Psi(\rho, \varphi, z), \quad (1)$$

где

$$U_{\text{conf}}(z) = U_0 - \frac{U_0}{\cosh^2(z/\beta)},$$

$$V_{\text{int}}(\rho, z) = -\frac{e^2}{\kappa} \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_{\text{imp}})^2}}. \quad (2)$$

Здесь β является полушириной, а U_0 – глубиной КЯ, z_{imp} – точка расположения водородоподобной примеси вдоль оси квантования, κ – диэлектрическая постоянная, e – элементарный заряд. Представим волновую функцию в виде:

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} R(\rho) \chi_n(z), \quad (3)$$

где $R(\rho)$ радиальная составляющая волновой функции, а $\chi_n(z)$ – составляющая

вдоль оси квантования. После некоторых преобразований приходим к следующему виду в декартовых координатах:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V_{\text{eff}}(\rho) \right] R(\rho) = (E - \varepsilon_z) R(\rho), \quad (4)$$

где

$$\varepsilon_z^{(n)} = U_0 - \frac{1}{4\beta^2} \left[-(1+2n) + \sqrt{1+4\beta^2 U_0} \right]^2, \quad (5)$$

$$V_{\text{eff}}(\rho) = -\frac{e^2}{\kappa} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\chi_n(z)|^2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_{\text{imp}})^2}} dz. \quad (6)$$

Здесь $V_{\text{eff}}(\rho)$ – эффективный кулоновский потенциал, возникающий в результате движения электрона вокруг примеси. Уравнение (4) будем решать на основе вариационного метода. Пробную волновую функцию основного состояния выберем в следующем виде:

$$R_0(\rho) = C e^{-\rho/\lambda}. \quad (7)$$

Здесь λ – вариационный параметр, а $C = \lambda^{-1} \sqrt{2/\pi}$ – постоянная нормировки.

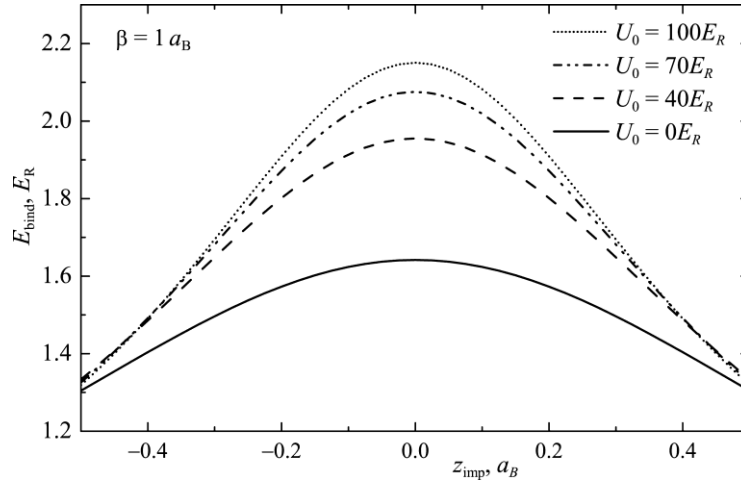


Рис.2. Зависимость энергии связи электрона от точки расположения водородоподобной примеси вдоль оси квантования при различных значениях параметра U_0 , когда параметр β фиксирован.

Энергию основного состояния найдем минимизируя следующий функционал:

$$\int_0^{\infty} R_0(\rho) \left[-\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\chi_n|^2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_{\text{imp}})^2}} dz \right] R_0(\rho) \rho d\rho. \quad (8)$$

Нами учитываются только состояния $n = 0$. Таким образом, для аксиальной составляющей волновой функции можем записать:

$$\chi_0(z) = \left(1 - \tanh^2(z/\beta)\right)^{\frac{1}{2}\beta\sqrt{U_0 - \varepsilon_z^{(0)}}}. \quad (9)$$

После минимизации данной функции:

$$\varepsilon(\lambda, z_{\text{imp}}) = \varepsilon_z^{(0)} + \frac{1}{\lambda^2} - \frac{8}{\lambda^2} \int_0^\infty e^{-2\rho/\lambda} \left(\int_{-\infty}^\infty \frac{|\chi_0|^2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_{\text{imp}})^2}} dz \right) \rho d\rho, \quad (10)$$

получаем энергию основного состояния $\min_\lambda \varepsilon(\lambda, z_{\text{imp}})$. Энергия связи электрона определяется как разность:

$$E_{\text{bind}} = \varepsilon_z^{(0)} - \min_\lambda \varepsilon(\lambda, z_{\text{imp}}). \quad (11)$$

Вышеуказанная минимизация была проведена с помощью численных методов, а полученные результаты проиллюстрированы в следующих графиках. На Рис.2 показана зависимость энергии связи электрона от координаты водородоподобной примеси вдоль оси квантования при различных значениях параметра U_0 , когда параметр β фиксирован. На рисунках все энергии приведены в относительных единицах эффективной энергии Ридберга, а длины – в эффективных боровских радиусах. Зависимость имеет куполообразный характер, а именно, когда примесь находится в центре КЯ энергия связи принимает свое максимальное значение. Вклад энергии размерного квантования увеличивается со сдвигом примеси от центра КЯ к стенкам, что, в свою очередь, приводит к уменьшению энергии связи. С увеличением глубины КЯ U_0 максимум энергии связи увеличивается.

Рис.3 показывает зависимость энергии связи от параметров КЯ β и U_0 . Как видим, из Рис.3а с увеличением значения параметра β энергия связи

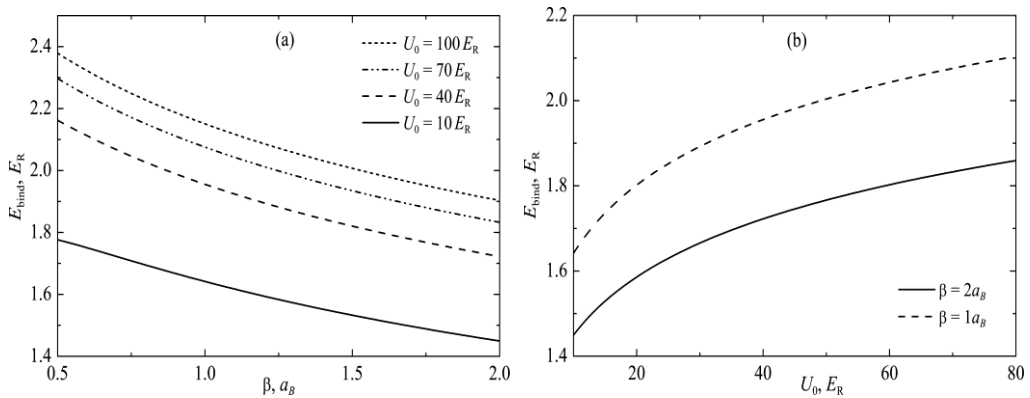


Рис.3. Зависимость энергии связи от (а) полуширины КЯ β и (б) глубины КЯ U_0 .

уменьшается из-за ослабления эффекта размерного квантования. Обратная картина наблюдается в случае зависимости энергии связи от глубины КЯ (Рис.3б): энергия связи увеличивается с увеличением значения параметра U_0 . Данные зависимости были получены для случая, когда примесный центр расположен в центре КЯ, то есть при $z_{\text{imp}} = 0$.

3. Коэффициент поглощения

В качестве следующего шага рассмотрим квантовые переходы между основным состоянием водородоподобной донорной примеси и основным состоянием зоны проводимости [17,18]. Волновые функции электрона донорной примеси Ψ_i и электрона зоны проводимости Ψ_f^* , ввиду явления размерного квантования, можно представить в следующем виде:

$$\Psi_i = \lambda^{-1} \sqrt{2/\pi} e^{-\rho/\lambda} \varphi_d, \quad (12)$$

$$\Psi_f^* = S^{-1/2} e^{-ik\rho} \varphi_c^*, \quad (13)$$

где

$$\varphi_d = C_{PT} \cdot \left(1 - \tanh^2(z/\beta)\right)^{\frac{1}{2}\beta\sqrt{U_0 - \varepsilon_z^{(0)}}}, \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \varphi_c^* = C_{PT} \left(1 - \tanh^2(z/\beta)\right)^{\frac{1}{2}\beta\sqrt{U_0 - \varepsilon_z^{(1)}}} \\ \times {}_2F_1\left\{\tilde{\varepsilon}_z^{(1)} - s, \tilde{\varepsilon}_z^{(1)} + s + 1, \tilde{\varepsilon}_z^{(1)} + 1, (1 - \tanh(z/\beta))/2\right\}. \end{aligned} \quad (15)$$

Здесь C_{PT} – коэффициент нормировки. В данном случае матричный элемент для квантовых переходов может быть записан как:

$$\mathbf{e}\mathbf{p}_{cd} = -\frac{1}{\sqrt{S}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{2\pi i \hbar \lambda e_z}{(1 + \lambda^2 k^2)^{3/2}} \Phi, \quad (16)$$

где через Φ обозначено:

$$\Phi \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_c^* \frac{\partial}{\partial z} \varphi_d dz. \quad (17)$$

Теперь перейдем к расчету коэффициента оптического поглощения, который при переходе донорный уровень–зона проводимости в исследуемой нами структуре дается следующей формулой [19]:

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{n c m_0^2 \omega \Omega} \sum_{i,f} |\mathbf{e}\mathbf{p}_{fi}|^2 [f(E_i) - f(E_f)] \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \quad (18)$$

где Ω – объем образца, n – показатель преломления, $E_i = E_d$ – энергия начального состояния, $E_f = E_c$ – энергия конечного состояния, $f(E)$ – функция

распределения электронов по энергиям, а наличие δ – функции в (18) обеспечивает закон сохранения энергии при переходах. Причем, так как при низких температурах, рассмотренных в данной работе, считаем, что донорный уровень занят электроном, а уровень в зоне проводимости свободен, то:

$$\begin{cases} f(E_d) = 1, \\ f(E_c) = 0. \end{cases} \quad (19)$$

Для учета релаксационных процессов, что в свою очередь приводит к уширению пика поглощения за счет уширения энергетических уровней, осуществим замену δ -функции на лоренцевский контур [20]:

$$\delta(E_f - E_i - \hbar\omega) = \frac{\Gamma}{\pi(E_f - E_i - \hbar\omega)^2 + (\Gamma)^2}. \quad (20)$$

Здесь Γ – параметр уширения, который в случае GaAs выбран $\Gamma = 0.75E_R$ [21–25].

Таким образом, окончательное выражение для вычисления коэффициента оптического поглощения при рассмотрении перехода между основным уровнем донорной примеси и первым уровнем зоны проводимости примет следующий вид:

$$\alpha_{01}(\omega) = \frac{32\pi^3 e^2 \hbar^3 e_z^2}{n c m_0^2 \Omega S} \cdot \frac{\lambda^2 \Phi^2}{\hbar\omega} \frac{\Gamma}{\pi(E_f - E_i - \hbar\omega)^2 + (\Gamma)^2}. \quad (21)$$

Рис.4 показывает зависимость показателя оптического поглощения $\alpha(\omega)$ от параметров КЯ β и U_0 как в случае параболического, так и для модифицированного потенциала Пешля-Теллера. Как видно из Рис.4а с увеличением значения параметра U_0 максимум поглощения смещается вправо из-за усиления

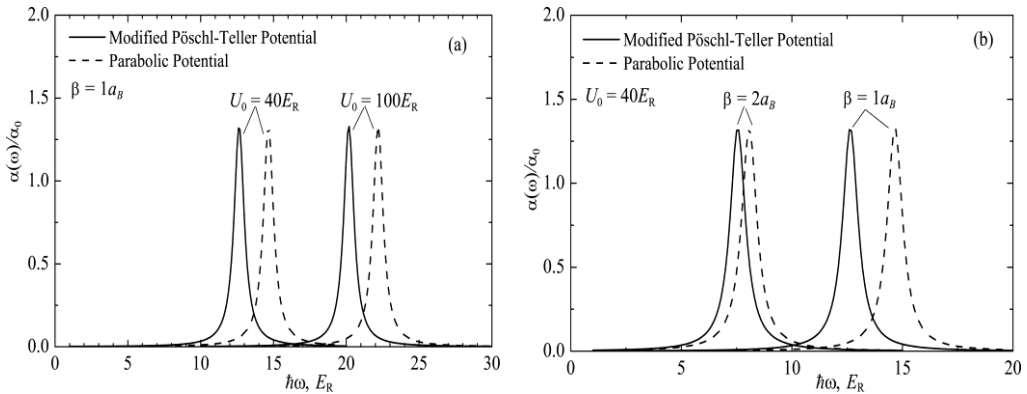


Рис.4. Спектр оптического примесного поглощения при разных значениях (а) параметра U_0 и (б) параметра β .

эффекта размерного квантования. Обратная картина наблюдается в случае зависимости от полуширины КЯ (Рис.4б): максимум поглощения смещается в обратном направлении с увеличением значения параметра β . Максимум поглощения в случае параболического потенциала всегда смещен правее соответствующего максимума модифицированного потенциала Пешля-Теллера, что объясняется бесконечным характером параболического потенциала.

4. Заключение

Таким образом, в данной работе были рассмотрены водородоподобные донорные примесные состояния в квантовой яме с модифицированным ограничивающим потенциалом Пешля-Теллера. В рамках вариационной теории была рассчитана зависимость энергии связи от положения водородоподобной донорной примеси, которая имеет колоколообразный характер. Расчеты были проведены для различных значений глубины потенциальной ямы. Показано, что энергия связи с увеличением полуширины β уменьшается, а с увеличением глубины ямы U_0 увеличивается. В конце работы приведены сравнительные оптические спектры примесного поглощения для параболического потенциала и модифицированного потенциала Пешля-Теллера. Как и ожидалось, существует сдвиг между оптическими линиями поглощения, а именно линии, соответствующие КЯ с ограничивающим потенциалом Пешля-Теллера, имеют красный сдвиг, так как этот потенциал имеет конечную глубину.

Автор выражает благодарность своему научному руководителю Д.Б. Айрапетяну за постановку задачи и полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Y. Horikoshi, M. Kawashima, H. Yamaguchi.** Japanese Journal of Applied Physics, **25**, L868 (1986).
2. **E. Lifshitz, M. Bashouti, V. Kloper, A. Kigel, M.S. Eisen, S. Berger.** Nano Letters, **3**, 857 (2003).
3. **J. Tersoff, C. Teichert, M.G. Lagally.** Physical Review Letters, **76**, 1675 (1996).
4. **P.M. Petroff, S.P. DenBaars.** Superlattices and Microstructures, **15**, 15 (1994).
5. **J.A. Barker, E.P. O'Reilly.** Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, **4**, 231 (1999).
6. **L. Brey, N.F. Johnson, B.I. Halperin.** Physical Review B, **40**, 10647 (1989).
7. **R.C. Miller, A.C. Gossard, D.A. Kleinman, O. Munteanu.** Physical Review B, **29**, 3740 (1984).
8. **D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.K. Tevosyan.** Superlattices and Microstructures, **64**, 204 (2013).
9. **D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.K. Tevosyan.** Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, **46**, 274 (2012).

10. **D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, T.V. Kotanjyan, H.K. Tevosyan.** Superlattices and Microstructures, **78**, 40 (2015).
11. **Д.Б. Айрапетян, Э.М. Казарян, О.Х. Тевосян.** Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 190 (2014).
12. **D.B. Hayrapetyan, S.M. Amirkhanyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan.** Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, **84**, 367 (2016).
13. **Д.Б. Айрапетян, А.Ш. Ачоян, Э.М. Казарян, О.Х. Тевосян.** Изв. НАН Армении, Физика, **48**, 420 (2013).
14. **D.B. Hayrapetyan, T.V. Kotanjyan, H.K. Tevosyan, E.M. Kazaryan.** Radiation Effects and Defects in Solids, **171**, 916 (2016).
15. **D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, L.S. Petrosyan, H.A. Sarkisyan.** Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, **66**, 7 (2015).
16. **E.M. Kazaryan, A.A. Kostanyan, H.A. Sarkisyan.** Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, **28**, 423 (2005).
17. **G. Bastard.** Physical Review B, **24**, 4714 (1981).
18. **L.E. Oliveira, R. Pérez-Alvarez.** Physical Review B, **40**, 10460 (1989).
19. **L.E. Vorob'ev, E.L. Ivchenko, D.A. Firsov, V.A. Shalygin.** Optical properties of nanostructures. Sankt-Petersburg, Nauka (2001).
20. **А.И. Ансельм.** Введение в теорию полупроводников. Москва, Наука (1978).
21. **M.R.K. Vahdani, G. Rezaei.** Physics Letters A, **373**, 3079 (2009).
22. **W. Xie.** Physica B: Condensed Matter, **405**, 3436 (2010).
23. **İ. Karabulut, S. Baskoutas.** Journal of Applied Physics, **103**, 073512 (2008).
24. **İ. Karabulut, H. Şafak, M. Tomak.** Journal of Physics D: Applied Physics, **41**, 155104 (2008).
25. **M. El Haouari, A. Talbi, E. Feddi, H. El Ghazi, A. Oukerroum, F. Dujardin.** Optics Communications, **383**, 231 (2017).

ABSORPTION SPECTRA OF HYDROGEN-LIKE DONOR IMPURITY IN GaAs QUANTUM WELL WITH MODIFIED PÖSCHL-TELLER POTENTIAL

T.A. SARGSIAN

Hydrogen-like donor impurity states in a quantum well with modified Pöschl-Teller confinement potential have been considered. The dependence of binding energy on hydrogen-like donor impurity's position and confinement potential parameters has been revealed. It has been shown that the dependence of binding energy on hydrogen-like donor impurity position has bell-shaped character. The existence of binding energy maximum is explained by the concurrency of size-quantization effect and Coulomb interaction between electron and hydrogen-like donor impurity. The coefficient of the optical absorption in the presence of hydrogen-like donor impurity center has been calculated. The absorption spectra for the quantum transitions between hydrogen-like donor impurity ground state and conduction band ground state have been obtained.