

УДК 621.315

ОСОБЕННОСТИ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ КРАЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В СЛАБО ЛЕГИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ ЯМАХ С УЧЕТОМ КУЛОНОВСКОЙ ЩЕЛИ

С.Л. АРУТЮНЯН

Гюмрийский филиал Государственного инженерного университета Армении

(Поступила в редакцию 5 мая 2008 г.)

Исследовано влияние кулоновской щели на тонкую структуру края фундаментального поглощения в квантовых ямах. Используя интерполяционную формулу, которая адекватно описывает влияние кулоновской щели в квантовых ямах в условиях слабого легирования независимо от степени компенсации, получено явное выражение для коэффициента поглощения, связанного с переходами из валентного уровня размерного квантования в примесную зону. Исследована также зависимость коэффициента поглощения квантовой ямы от степени легирования и компенсации образца.

1. Введение

Несмотря на многочисленные дискуссии на пути признания, концепция кулоновской щели в настоящее время весьма популярна, что связано с накоплением многочисленных экспериментальных фактов, которые можно объяснить только исходя из основных представлений этой концепции [1-3]. В связи с этим в первую очередь необходимо отметить также успехи ряда экспериментальных методик, к числу которых, в частности, относятся VRH (variable range hopping) спектроскопия, изучение перехода металл-изолятор [4,5], туннельная спектроскопия 2D электронов в магнитном поле [6]. Несмотря на это, строгой аналитической теории структуры примесной зоны с учетом кулоновской корреляции не существует.

В условиях отсутствия строгой теории структуры примесной зоны, при исследовании физических свойств 3D и 2D образцов, определяющихся структурой примесной зоны, в основном используются различные численные методы [7]. А аналитические исследования ведутся в основном в следующих трех направлениях.

В первом из них используются функции плотности состояний, которые получены в случаях предельно слабых и сильных компенсаций (см., напр., [3,8]). Во втором, используя самосогласованную теорию, удалось получить универсальную формулу для плотности состояний для 3D и 2D образцов, которая справедлива только вблизи уровня Ферми (см., напр., [2]). В третьем, вдали от уровня Ферми, в зависимости от условий задачи, выбирают ту или иную функцию (см.

[9-11]), которая справедлива в определенном узком интервале изменения энергии.

В отличие от указанных работ, в [12] приводится интерполяционная формула, которая в широком интервале энергии адекватно описывает как структуру, так и эволюцию примесной зоны при изменении степени компенсации в слабо легированных 3D полупроводниках. В работе [13], с учетом особенностей поведения функции плотности состояний $g(\epsilon)$ вблизи уровня Ферми [3] предложена функция

$$g(\epsilon) = (2n_D |\epsilon - \mu| / \epsilon_D^2) \exp\left[(\mu^2 - \epsilon^2) / \gamma^2\right] \quad (1)$$

с подгоночными параметрами μ и γ . Здесь параметр μ есть уровень Ферми, а γ характеризует ширину пиков, $\epsilon_D = 2e^2 / (\chi_1 + \chi_2) \rho_D$ – энергия кулоновского взаимодействия на среднем расстоянии $\rho_D = (\pi n_D)^{-1/2}$ между донорами в плоскости интерфейса, $n_D = N_D d$ – поверхностная плотность доноров, d – ширина квантовой ямы. В формуле (1) энергия отсчитывается от уровня энергии основного состояния изолированного донора в квантовой яме: $E_D = 16E_{3D}\chi^2 / (\chi_1 + \chi_2)^2$ (см. [14]), E_{3D} – энергия ионизации 3D донора, χ , χ_1, χ_2 – диэлектрические проницаемости квантовой ямы и окружающих сред, соответственно.

Общеизвестно, что основные характеристики многочисленных оптоэлектронных приборов определяются тонкой структурой края фундаментального поглощения [15], которая как в легированных массивных полупроводниках [16], так и в размерно-квантованных квантовых ямах [17,18] определяется особенностями примесных состояний. В настоящей работе исследованы основные особенности тонкой структуры края фундаментального поглощения, которые формируются в результате переходов электронов из размерно-квантованной валентной подзоны в примесную зону слабо легированной квантовой ямы, структура которой определяется функцией плотности состояний (1).

2. Основные исходные предположения, коэффициент поглощения и обсуждение результатов

Для выявления влияния примесной зоны на край фундаментального поглощения будем предполагать, что размерное квантование осуществляется в направлении z , а слабая электромагнитная волна распространяется под углом θ к нормали пленки. Если частота монохроматической электромагнитной волны ω , а волновой вектор q , то для оператора возмущения в общем случае будем иметь:

$$\hat{V} = \hat{V}_z + \hat{V}_p, \quad (2)$$

$$\hat{V}_z = -(ie\hbar/m_0c) \left[A_0 \sqrt{P(\theta)} \exp i(q \cos \theta z + q \sin \theta y) \exp(-i\omega t) \right] (d/dz), \quad (3)$$

$$\hat{V}_p = -\frac{ie\hbar}{m_0c} A_0 \sqrt{1-P(\theta)} \cdot \exp i(q \cos \theta z + q \sin \theta y) \exp(-i\omega t) \cdot (\mathbf{e}_p \nabla_p), \quad (4)$$

где m_0 – масса свободного электрона, A_0 – амплитуда вектора-потенциала электромагнитной волны, $P(\theta)$ – фактор, зависящий от поляризации электромагнитной волны, который имеет вид

$$P(\theta) = \begin{cases} \sin^2 \theta & \text{для } \pi \text{- поляризации,} \\ 0 & \text{для } \sigma \text{- поляризации,} \\ \sin^2 \theta / 2 & \text{для циркулярной поляризации.} \end{cases}$$

Волновая функция конечного состояния примесной зоны, расположенного под первым уровнем размерного квантования в зоне проводимости, имеет вид

$$\Psi_f = \frac{1}{\sqrt{S}} U_{c,0}(\mathbf{r}) F(\mathbf{p}) X_{c,1}(z), \quad (5)$$

и если энергия отсчитывается от середины запрещенной зоны, то для функции плотности конечных состояний из формулы (1) будем иметь

$$g_f(\varepsilon) = \frac{2n_D \left| \varepsilon - \frac{E_g}{2} - E_1 + E_D - \mu \right|}{\varepsilon_D^2} \exp \frac{\mu^2 - \left(\varepsilon - \frac{E_g}{2} - E_1 + E_D \right)^2}{\gamma^2}. \quad (6)$$

Волновая функция, энергетический спектр и функция плотности состояний электронов исходного состояния (валентная зона) даются формулами

$$\begin{aligned} \Psi_i(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{S}} U_{v,k}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{p}) X_{v,n}(z), \\ \varepsilon_i &= -\frac{E_g}{2} - E_n - \frac{p^2}{2m_v}, \\ g_i(\varepsilon) &= \frac{m_v}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \Theta \left(-\frac{E_g}{2} - E_n - \varepsilon \right). \end{aligned} \quad (7)$$

В формулах (5)–(7) использованы следующие обозначения: S – площадь интерфейса, $F(\mathbf{p}) = \sqrt{2/\pi a^2} \exp(-\mathbf{p}/a)$ – волновая функция, $a = a_{3D}(\chi_1 + \chi_2)/4\chi$ – радиус области локализации донорного электрона в яме, a_{3D} – боровский радиус донора в массивном образце, $X_{c,v,n}(z)$, E_n – волновая функция и энергия в направлении размерного квантования, соответственно, E_g – ширина запрещенной зоны, m_v – масса валентного электрона, $\Theta(x)$ – единичная ступенчатая функция.

Исходя из формул (1)–(7), легко убедиться, что указанные переходы могут осуществляться только под действием возмущения (4). Пренебрегая компонентой импульса фотона в плоскости интерфейса [17] и исключая матричный элемент импульса $\mathbf{p}_{c,v}$ при помощи соотношения

$|\mathbf{e}_{p,v}|/m_0 = (3E_g/4m)^{1/2}$ ($\mathbf{e}$ – единичный вектор в направлении поляризации, $m^{-1} = m_c^{-1} + m_v^{-1}$) [19], для соответствующего матричного элемента перехода будем иметь

$$\langle f | \hat{V}_p | i \rangle = \frac{eA_0}{c} \sqrt{1-P(\theta)} \left(\frac{3E_g}{4m} \right)^{\frac{1}{2}} F_{1n} \left(\frac{E_D}{E_D - \frac{E_g}{2} - E_n - \varepsilon} \right)^{\frac{3}{2}}, \quad (8)$$

где $F_{1,n} = \int X_1(z) X_n(z) \exp(iqz \cos \theta) dz$.

Для вычисления коэффициента поглощения следует учесть, что конечное состояние перехода (5) не обладает определенным импульсом и стандартный метод “вертикальных” переходов [17] неприменим, поэтому необходимо использовать более общую методику Кубо–Гринвуда (см., напр., [20]).

Если ширина квантовой ямы $d \leq 50 \text{ \AA}$, то для кристалла GaAs ($E_g = 1.424$ эВ) вблизи края фундаментального поглощения $qd = (E_g d / \hbar c) \leq 0.036$, и, следовательно, применимо дипольное приближение. С другой стороны, для любой модели потенциала ямы в дипольном приближении диагональный матричный элемент $F_{1,1} \approx 1$, в то время как для недиагональных элементов соответственно имеем $F_{1,n} \ll 1$ [17]; следовательно, возможны только переходы в первую подзону размерного квантования зоны проводимости.

Учитывая указанные особенности, применяя стандартную методику с учетом (6), при $T = 0$ для коэффициента поглощения с единичной поверхности интерфейса получаем

$$K(\omega) = 12\pi\alpha \frac{n_D}{n_0 d} \left(\frac{E_g E_D^2}{\hbar\omega \varepsilon_D^2} \right) (1-P(\theta)) G \left(\frac{\hbar\omega - I_0}{E_D} \right) \theta \left(\frac{\hbar\omega - I_0}{E_D} \right), \quad (9)$$

где частотная зависимость коэффициента поглощения определяется следующей функцией:

$$G(\Omega) = \frac{1}{\Omega} \int_0^1 \frac{x}{\left(1 + \frac{1}{\Omega} - x\right)^3} \exp \left[-\frac{E_D^2}{\gamma^2} \left(\Omega^2 x^2 + 2\Omega x \frac{\mu}{E_D} \right) \right] dx. \quad (10)$$

Здесь $\alpha = e^2 / \hbar c$ – постоянная тонкой структуры, n_0 – показатель преломления кристалла, $\Omega = (\hbar\omega - I_0) / E_D$, I_0 – порог поглощения, который определяется формулой

$$I_0 = E_g + \Delta E - E_D + \mu, \quad (11)$$

где $\Delta E = \hbar^2 \pi^2 / 2md^2$ – увеличение ширины запрещенной зоны за счет размерного квантования в модели бесконечно глубокой потенциальной ямы.

Из формулы (9) следует, что коэффициент поглощения имеет четкий порог поглощения, определяемый формулой (11). С уменьшением степени компенсации величина I_0 увеличивается (из-за увеличения энергии Ферми μ

[13]), и поэтому порог поглощения смещается в область коротких волн. За порогом поглощения частотная зависимость $K(\omega)$ в основном определяется функцией $G(\Omega)$.

Как видно из формулы (7), функция $F(\Omega)$ зависит от параметров $(E_D/\gamma)^2 = (\chi^2 r_D^2 / 4a_D^2)a$ и $\mu/E_D = (2a_D/\chi r_D)c$, где численные значения параметров a и c , которые определяются соотношениями $\mu = c\epsilon_D$, $\gamma = \epsilon_D a^{-1/2}$, при различных значениях степени компенсации приведены в работе [13].

Как видно из (10), функция $G(\Omega)$ зависит от параметров

$$\left(\frac{E_D}{\gamma}\right)^2 = \frac{a}{2\pi n_D a_D^2}, \quad \frac{\mu}{E_D} = \pi a_D^2 n_D c, \quad (12)$$

где численные значения параметров a и c при различных значениях степени компенсации приведены в работе [13].

Используя значения параметров a и c для кристалла GaAs ($a_D = 104 \text{ \AA}$) при концентрации основных примесей $N_D = 10^{15} \text{ см}^{-3}$ и $d = 50 \text{ \AA}$ для параметров (12) для разных степеней компенсации $K = 0.1, 0.5, 0.9$ соответственно будем иметь: $(E_D/\gamma)^2 = 1152, 588.591, 1152$; $\mu/E_D = 0.025, 0, -0.025$.

С учетом численных оценок на рис.1 показаны графики функции $G(\Omega)$ от безразмерной расстройки Ω , при разных степенях компенсации $K = 0.1, 0.5, 0.9$. Как видно из рисунка, с увеличением степени компенсации K значение функции $G(\Omega)$ увеличивается, что связано с увеличением числа ионизированных доноров, т.е. с увеличением высоты пика, соответствующего незаполненным состояниям.

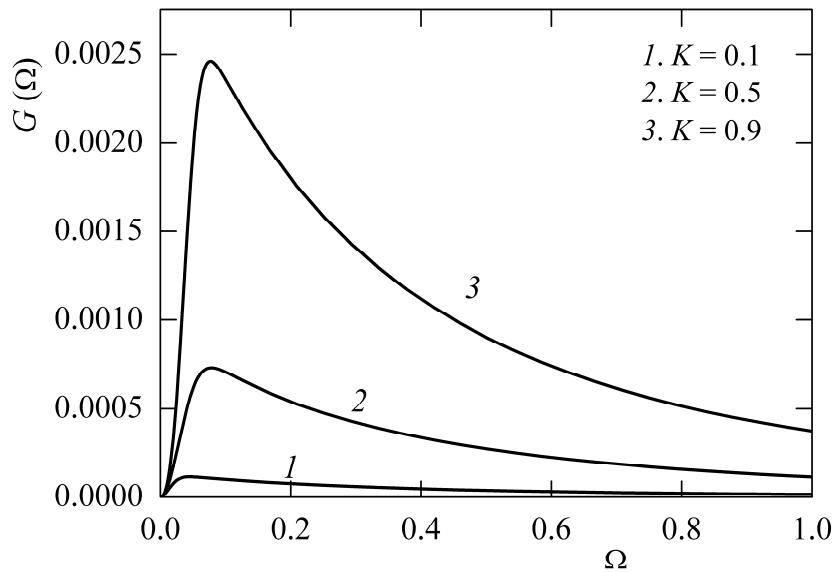


Рис.1. Зависимость функции $G(\Omega)$ от безразмерной расстройки Ω при разных степенях компенсации:
1 – $K = 0.1$; 2 – $K = 0.5$; 3 – $K = 0.9$

Рассмотрим представляющие интерес следующие частные случаи.

а) Вблизи порога поглощения $\hbar\omega \approx I_0$ ($\Omega \ll 1$), $G(\Omega) \approx \Omega^2/2$ и из (10) следует, что за порогом поглощения коэффициент поглощения имеет вид

$$K(\omega) = \frac{6\pi\alpha}{n_0 d} \frac{E_g}{I_0} (1 - P(\theta)) \frac{\chi^2 (\hbar\omega - I_0)^2}{\pi e^4}. \quad (13)$$

Как видно из формулы (13), коэффициент поглощения зависит только от характеристик матрицы и не зависит от степени легирования и компенсации. Это, очевидно, связано с универсальным характером функции плотности состояний.

б) Вдали от порога поглощения $-\Omega \gg 1$. Вычисляя интеграл (10) по методу Лапласа, получаем $G(\Omega) = \left(\sqrt{\pi/e'}\right) (\gamma^2/2E_D^2\Omega^3)$ (здесь e' – число Эйлера), и для $K(\omega)$ будем иметь

$$K(\omega) = 6\sqrt{\frac{\pi^3}{e'}} \frac{a}{n_0 d} (1 - P(\theta)) \frac{E_g \gamma^2 E_D^3}{\varepsilon_D^2 (\hbar\omega)^4}. \quad (14)$$

Из формулы (14) следует, что в этой области частот коэффициент поглощения $K(\omega)$ быстро уменьшается с увеличением частоты.

Исходя из полученных результатов, можно утверждать, что при температурах, близких к абсолютному нулю, коэффициент поглощения в общих чертах повторяет вышеописанное поведение и имеет следующие особенности: в результате термических эффектов исчезает четкий порог и пик поглощения перемещается в сторону высоких частот.

Работа выполнена в рамках государственной целевой программы Республики Армения “Полупроводниковая наноэлектроника.”

ЛИТЕРАТУРА

1. **B.I.Shklovskii, A.L.Efros.** Electronic properties of doped semiconductors. Berlin, Springer-Verlag 1984.
2. **В.Л.Бонч-Бруевич** и др. Электронная теория неупорядоченных полупроводников. М., Наука, 1981.
3. **Б.И.Шкловский, А.Л.Эфрос.** Электронные свойства легированных полупроводников. М., Наука, 1979.
4. **А.Г.Забродский.** УФН, **168**, 804 (1998).
5. **А.Г.Андреев, А.Г.Забродский, И.П.Звягин, С.В.Егоров.** ФТП, **31**, 1174 (1997).
6. **Э.В.Девятов, А.А.Шашкин, В.Т.Долгополов, В.Ханзен, М.Холланд.** УФН, **170**, 327 (2000).
7. **В.М.Борздов, Т.А.Петрович,** ФТП, **31**, 89 (1997).
8. **S.L.Narutyunyan, V.A.Narutyunyan, H.A.Jivanian, G.H.Demirjian.** Thin Solid Films, **258**, 347 (1995).
9. **Н.А.Поклонский, С.Ю.Лопатин, А.Г.Забродский.** ФТТ, **42**, 3 (2000).
10. **Д.В.Николаев, В.Н.Архипов, В.Р.Никитенко.** ФТП, **34**, 682 (2000).
11. **С.Л.Арутюнян.** Изв. НАН Армении, Физика, **37**, 297 (2002).
12. **С.Л.Арутюнян.** ФТТ, **47**, 581 (2005).

13. **С.Л.Арутюнян.** Материалы Международной научной конференции «Тонкие пленки и наноструктуры», «Пленки 2004», ч. 1, Москва, 2004, с. 72.
14. **L.V.Keldysh.** Phys. stat. sol. (a), **164**, 3 (1997).
15. **M.J.Kelly.** Semicond. Sci. and Technol., **5**, 1209 (1990).
16. **Ю.И.Уханов.** Оптические свойства полупроводников. М., Наука, 1977.
17. **Л.Е.Воробьев** и др. Оптические свойства наноструктур. Санкт-Петербург, Наука, 2001.
18. **В.П.Драгунов** и др. Основы наноэлектроники. М., Логос, 2006.
19. **Л.В.Келдыш.** ЖЭТФ, **45**, 364 (1963).
20. **Н.Мотт, Э.Дэвис.** Электронные процессы в некристаллических веществах, т.1, М., Мир, 1982.

ԿՈՒՆՆՅԱՆ ՃԵՂՔԻ ԱԶԴԵՅՈՒԹՅՈՒՆԸ ԹՈՒՅԼ ԼԵԳԻՐԱՅՎԱԾ
ԿԻՍԱՀԱՂՈՂԴՍՅՈՒՆ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ՓՈՍԵՐԻ ՀԻՄՆԱՐԱՐ ԿԼԱՆՄԱՆ
ԵԶՐԻ ՆՈՒՐԲ ԿԱՌՈՒՅՎԱԾՔԻ ՎՐԱ

Ս.Լ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ

Ուսումնասիրված է քվանտային փոսերում կուլոնյան ճեղքի ազդեցությունը հիմնարար կլանման եզրի նուրբ կառուցվածքի վրա: Օգտագործելով ներմոտարկման բանաձևը, որը համարժեքորեն նկարագրում է կուլոնյան ճեղքի ազդեցությունը քվանտային փոսերում թույլ լեգիրացման և կամայական համակշռման աստիճանի դեպքում, ստացված է չափային քվանտացման արժեքային մակարդակից խառնուրդային գոտի անցումներով պայմանավորված կլանման գործակցի արտահայտությունը: Ուսումնասիրված է նաև կլանման գործակցի կախումը լեգիրացման և համակշռման աստիճանից:

FEATURES OF THE FINE STRUCTURE OF THE FUNDAMENTAL
ABSORPTION EDGE IN LOW-DOPED SEMICONDUCTOR QUANTUM WELLS WITH
ALLOWANCE FOR THE COULOMB GAP

S.L. HARUTYUNYAN

The influence of the Coulomb gap on the fine structure of the fundamental absorption edge in quantum wells is investigated. Using the interpolation formula, an explicit expression for the light absorption coefficient related to transitions from the valence level of size quantization to the impurity band is obtained regardless of the degree of compensation. The dependence of the absorption coefficient of a quantum well on the levels of doping and compensation is also studied.