

ГЛУБОКИЕ АКЦЕПТОРНЫЕ СОСТОЯНИЯ В АСИММЕТРИЧНЫХ СИСТЕМАХ КВАНТОВЫХ ЯМ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

В.И.Белявский, Ю.В.Конаев, Ю.А.Померанцев*, С.В.Шевцов**

*Физический институт им.П.Н.Лебедева РАН
117924 Москва, Россия*

**Воронежский государственный педагогический университет
Воронеж, Россия*

Поступила в редакцию 22 июня 1995 г.

Существенное влияние электрического поля на энергии ионизации глубоких акцепторов в асимметричных системах квантовых ям обусловлено полевой зависимостью смешивания состояний в подзонах тяжелых и легких дырок. Зависимость энергии ионизации от поля и положения примеси в структуре рассчитана в модели сильно локализованного потенциала.

1. В работе [1] рассмотрен эффект изменения энергии ионизации донорной примеси в системе квантовых ям (КЯ), обусловленный передислокацией электронных огибающих функций при наложении электрического поля, продольного по отношению к оси роста гетероструктуры (ГС), а также указаны некоторые возможности использования этого эффекта. Под действием поля имеет место также передислокация дырочных огибающих, но эффект, подобный рассмотренному в [1], может иметь место лишь при весьма больших значениях поля, что обусловлено различием электронных и дырочных эффективных масс в таких ГС, как $Al_xGa_{1-x}As-GaAs$. Тем не менее, сильное изменение энергии ионизации глубоких акцепторов в специально подобранных системах КЯ может иметь место и в умеренных полях, даже меньших по сравнению с теми, которые необходимы для эффективной передислокации электронных огибающих.

Действительно, одномерный потенциал, модулирующий потолок валентной зоны полупроводниковых ГС с КЯ, приводит не только к снятию вырождения валентной зоны в центре зоны Бриллюэна, но и к специфическим интерференционным эффектам в системе подзон тяжелых и легких дырок. Подобное смешивание состояний [2] может, в отдельных случаях, особенно в асимметричных системах КЯ, существенно изменить характер закона дисперсии дырок в некоторых подзонах, вплоть до изменения знака эффективной массы. При этом эффекты непараболичности в законе дисперсии могут стать весьма существенными уже при относительно небольших величинах поперечного (по отношению к оси ГС) квазимпульса дырки.

Смешивание состояний, например, в первой подзоне легких дырок (ЛН1) и второй подзоне тяжелых дырок (НН2) проявляется наиболее сильно, когда края этих подзон оказываются достаточно близкими друг к другу. В асимметричных системах КЯ, в отличие от ГС с единственной прямоугольной КЯ, порядок следования ЛН1- и НН2-подзон существенно зависит от геометрии ГС: например, изменением размеров КЯ и барьеров или глубины КЯ можно сравнительно легко поменять местами эти две подзоны. Можно убедиться в том, что подобный эффект имеет место и в случае ГС в продольном внешнем электрическом поле: уже при сравнительно малой величине поля в случае ГС с достаточно близкими ЛН1- и НН2-подзонами происходит своеобразная инверсия

дырочного спектра. Существенным является то, что в окрестности критического поля F_m смешивание состояний наиболее сильное, и подзона, оказавшаяся при данном поле $F \approx F_m$ нижней, имеет аномальный закон дисперсии, то есть отрицательную эффективную массу. В окрестности образующейся при этом так называемой петли экстремумов [3] плотность состояний имеет вид, характерный для одномерных (1D) систем. В $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$ нижней дырочной подзоной является первая подзона тяжелых дырок (НН1), поэтому радикальное изменение характера закона дисперсии в НН2-подзоне не может не отразиться, например, на величине энергии связи таких глубоких акцепторных состояний, которые в силу своей симметрии отщепляются от зоны тяжелых дырок.

В настоящей работе мы рассмотрим зависимость энергии связи подобных глубоких акцепторов как от величины электрического поля, так и от их положения в системе КЯ. Рассматриваются ГС типа I с несколькими узкими прямоугольными (в отсутствие поля) КЯ и туннельно прозрачными барьерами без каких-либо ограничений на геометрические параметры структуры. Для исследования дырочных состояний использован известный метод огибающих функций в рамках приближения эффективной массы [4]; условия для огибающих на гетерограницах, как обычно, соответствуют непрерывности огибающих и сохранению потока вероятности, вычисляемого на этих огибающих [4].

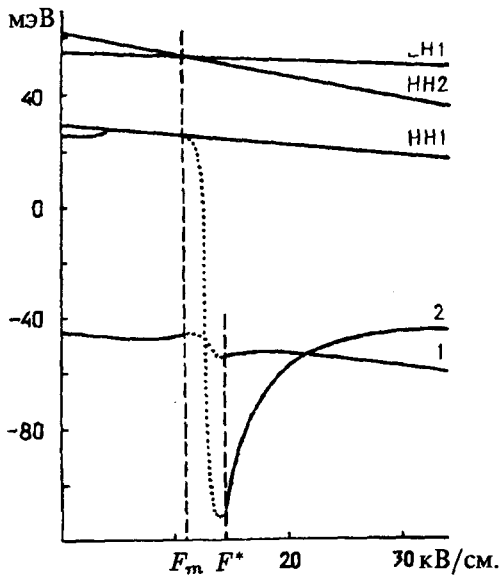
2. Электрическое поле, приложенное перпендикулярно гетерограницам, приводит к наклону потенциального рельефа ГС; при этом все размерно-квантованные состояния становятся квазистационарными [5]. Мы ограничимся рассмотрением относительно слабых полей с тем, чтобы иметь возможность пренебречь эффектами туннелирования из нижних подзон размерного квантования через крайний барьер ГС:

$$F \ll \frac{m^{1/2}(V_0 - E)^{3/2}}{\hbar e},$$

где m – эффективная масса дырки, V_0 – высота потенциального рельефа для дырки в ГС, E – энергия края дырочной подзоны размерного квантования. Для ГС $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$ при $x \leq 0,3$ для нижних подзон $V_0 - E \approx 100$ мэВ, что приводит к неравенству $F \ll 10^6$ В/см. Поэтому при рассмотрении таких слабых полей мы будем пренебрегать наклоном потенциального рельефа в крайних (полубесконечных) барьерных слоях, ограничивающих систему КЯ.

Условие разрешимости системы 1D уравнений для огибающих функций внутри КЯ и барьеров, вытекающее из граничных условий, позволяет определить энергетический спектр дырки в каждой подзоне при заданном значении поля. Процедура определения энергетического спектра и соответствующих огибающих может быть существенно упрощена, если учесть, что к смешиванию состояний тяжелых и легких дырок приводят недиагональные по спинорным индексам элементы гамильтониана Латтинджерá [6], исчезающие при $k \rightarrow 0$, где k – поперечный квазиимпульс дырки. Поскольку в формировании локальных состояний существенна область квазиимпульсов $ka \ll 1$ [7], где a – постоянная решетки, вклад недиагональных элементов гамильтониана можно учесть по теории возмущений.

Численное решение, полученное, например, для ГС с двумя КЯ шириной $8a$ и $4a$, разделенными барьером шириной $4a$ (структура 8–4–4), показывает, что пересечение термов ЛН1 и НН2 имеет место при $F_m \approx 10^4$ В/см. Аналогичное поведение демонстрируют также многие асимметричные ГС с более чем двумя



Зависимость энергии 2D подзон (НН1, НН2 и ЛН1) размерного квантования при $k = 0$ от напряженности электрического поля. Энергия связи глубокого акцептора, находящегося в середине более широкой КЯ (кривая 1) и в середине более узкой КЯ (кривая 2), как функция напряженности поля

КЯ. Как видно из рисунка, на котором показано смещение краев подзон в зависимости от поля, расстояние $\Delta(F)$ между краями ЛН1- и НН2-подзон практически линейно зависит от поля и, следовательно, может быть записано как

$$\Delta(F) = \Delta_0 \left(1 - \frac{F}{F_m} \right), \quad (1)$$

где Δ_0 – расстояние между краями ЛН1- и НН2-подзон при $F = 0$. В принятом здесь приближении смешивание состояний тяжелых и легких дырок при $k = 0$ отсутствует, как, соответственно, отсутствует и эффект отталкивания уровней при $F \approx F_m$.

3. Величиной $\Delta(F)$ фактически определяются эффективные массы дырок в ЛН1- и НН2-подзонах. Действительно, эффективные массы $m_\lambda^{(0)}$, где λ – индекс подзоны размерного квантования, вычисленные в нулевом по недиагональным элементам гамильтониана Латтинджера приближении и выражающиеся через параметры Латтинджера γ_1 и γ_2 , уже частично учитывают проникновение огибающих в области барьерных слоев. Во втором порядке теории возмущений вклад в закон дисперсии, пропорциональный k^2 , имеет происхождение от матричного элемента

$$\langle \lambda' | \hat{L} | \lambda \rangle = 3^{1/2} (k_x - ik_y) \langle \lambda' | [\gamma_3(z), -i\partial/\partial z]_+ | \lambda \rangle, \quad (2)$$

где γ_3 – третий параметр Латтинджера, а $[\hat{A}, \hat{B}]_+$ – симметризованное произведение операторов \hat{A} и \hat{B} , обеспечивающее эрмитовость оператора \hat{L} , зависящего от координаты z вдоль оси роста ГС. Поскольку ЛН1- и НН2-подзоны весьма близки друг к другу, можно ограничиться лишь учетом вклада этих подзон при определении поправки к энергии. Так как вычисление эффективной массы производится при $k \rightarrow 0$, то при всех F , за исключением малой окрестности точки F_m , матричный элемент (2) оказывается гораздо меньше $\Delta(F)$, так что при расчете второй поправки к энергии для последующего вычисления эффективной массы можно воспользоваться обычной теорией возмущений.

Обозначая A – вклад (в единицах $\hbar^2/2m_0$, m_0 – масса свободного электрона) от матричного элемента (2) в энергию дырки, обратную эффективную массу в λ -подзоне можно записать как

$$m_0/m_\lambda = m_0/m_\lambda^{(0)} \pm A/\Delta(F), \quad (3)$$

где верхний знак соответствует $\lambda = \text{НН2}$, а нижний – $\lambda = \text{ЛН1}$. Из (3) следует, что, в принципе, существуют значения поля, F_\pm , при которых обратные эффективные массы НН2- и ЛН1-дырок, соответственно, проходят через нуль. При значении поля F_m знак меняют сами эффективные массы этих дырок. Учет вклада других подзон в эффективные массы ЛН1- и НН2-дырок не меняет характера зависимости (3), приводя лишь к некоторой перенормировке первого слагаемого. Таким образом, записав закон дисперсии дырок в λ -подзоне с точностью до членов четвертого порядка по квазиимпульсу в виде

$$E_\lambda(k) = E_\lambda^{(0)} + \hbar^2 k^2/2m_\lambda + \hbar^2 b_\lambda^2 k^4/2m_0, \quad (4)$$

эффективные массы ЛН1- и НН2-подзон можно рассматривать как известные функции напряженности электрического поля F . Параметры b_λ , явно учитывающие непараболичность закона дисперсии, в принципе, также зависят от поля, однако в отличие от эффективных масс, особых точек в этой зависимости, очевидно, не имеют. Поэтому далее эти величины рассматриваются как феноменологические параметры; как можно убедиться [2], их типичные значения составляют от 10^{-7} см до 10^{-6} см. Таким образом, закон дисперсии для некоторых подзон существенно зависит от внешнего параметра F , изменением которого можно добиться обращения в нуль соответствующих обратных эффективных масс и, следовательно, эффективного понижения размерности системы [8].

Для закона дисперсии дырок в нижней (НН1) подзоне эффективная масса m_1 слабо зависит от поля, поэтому достаточно ограничиться обычным параболическим приближением $E_1(k) = \hbar^2 k^2/2m_1$ (далее используются сокращенные обозначения $\lambda = 1, 2$ для индексов подзон тяжелых дырок НН1 и НН2). В связи с принятым здесь приближением необходимо отметить, что при $m_2 < 0$ эффективные массы и параметр b_2 не могут выбираться независимо друг от друга. Действительно, в силу условия $E_2(k) > E_1(k)$ имеем очевидное неравенство

$$|m_2| > \frac{m_1}{\sqrt{\left(\frac{2m_\lambda b_\lambda}{m_0}\right)^2 + 1} - 1}, \quad (5)$$

где $x_0^2 = 2m_0 b_2^2 E_2^{(0)}/\hbar^2$. Так, для $b_2 \approx 10^{-6}$ см, $m_1 = 0,133m_0$ и $E_2^{(0)} = 30$ мэВ величина $|m_2|$ не может стать меньше, чем приблизительно $0,09m_0$. Поэтому обозначенная на рисунке область полей $F_m < F < F^*$, в которой неравенство (5) не выполняется, требует особого рассмотрения.

4. В предельном случае сильной локализации потенциал, формирующий глубокое акцепторное состояние, можно представить в виде

$$U(\mathbf{r}) = -U_0 a^3 \delta(\vec{\rho}) \delta(z - z_0), \quad (6)$$

где z_0 – z -координата примеси в ГС, $\vec{\rho}$ – поперечный радиус-вектор, постоянная решетке a входит в определение (6) исключительно из соображений сохранения

обычной размерности глубины потенциальной ямы U_0 . Уравнение Лифшица [9], определяющее уровни энергии локализованных состояний дырки, может быть записано как

$$\frac{(U_0 a^3)}{(2\pi)^2} \sum_{\lambda} |f_{\lambda}(z_0; F)|^2 \int (E_{\lambda}(k) - E)^{-1} d^2 k = 1, \quad (7)$$

где $f_{\lambda}(z; F)$ – зависящая от напряженности электрического поля F огибающая функция дырки в λ -подзоне, интегрирование производится по двумерной (2D) зоне Бриллюэна, а суммирование, в силу сделанного выше предположения о том, что локализованное состояние формируется зоной тяжелых дырок, распространяется только на 2D подзоны тяжелых дырок. В случае узких КЯ и барьеров достаточно учесть лишь небольшое число подзон; далее в расчет принимаются только две подзоны: НН1 и НН2.

При качественном исследовании уравнения (7) слабой зависимостью относительного положения краев подзон НН2 и НН1 от внешнего поля F можно пренебречь, полностью связав полевую зависимость энергии связи акцепторного состояния с зависимостью эффективной массы НН2-подзоны и огибающих функций НН1- и НН2-подзон от F . Для закона дисперсии (4) интегралы в (7) выражаются в элементарных функциях, что позволяет легко численными методами получить зависимость энергии связи E_i от F , которая представлена на рисунке.

Отметим, что сравнительно нетрудно указать такие ГС, в которых помимо полей F_m и F_+ , при которых, соответственно, обращаются в нуль эффективные массы ЛН1- и НН2-дырок (F_m), а также меняет знак (проходя через $\pm\infty$) эффективная масса НН2-дырки (F_+), существует поле F_- , при котором меняет знак масса ЛН1-дырки. Разумеется, можно подобрать ГС с иным чередованием нижних дырочных подзон при $F=0$, то есть вместо последовательности НН1, ЛН1, НН2 при $F=0$ имеет место другая последовательность: НН1, НН2, ЛН1.

Очевидно, что в интервале $F_- < F < F_m$ отрицательна эффективная масса ЛН1-дырки, тогда как в интервале $F_m < F < F_+$ отрицательна масса НН2-дырки. Именно в этих интервалах имеет место эффективное понижение размерности (2D \Rightarrow 1D) для соответствующих дырочных состояний. Поэтому, если глубокое акцепторное состояние формируется подзонами как тяжелых, так и легких дырок, аномального поведения энергии связи как функции поля следует ожидать при $F_- < F < F_+$.

Энергия связи чрезвычайно сильно зависит от положения z_0 глубокого центра в ГС, как это можно увидеть непосредственно из уравнения (7). Так, если глубокий центр приходится на узел огибающей функции НН2-подзоны, то очевидно, что соответствующее слагаемое выпадает из суммы в (7), поэтому в этом случае никакие аномалии в зависимости энергии связи от F не возникают. Наиболее заметным образом эффективное понижение размерности дырочных состояний проявляется в том случае, когда z_0 приходится на максимум НН2-огибающей. Таким образом, селективное легирование может (в определенных пределах) обеспечить необходимую величину энергии локализованного на глубоком акцепторе состояния.

К глубоким акцепторным состояниям в GaAs приводят многие примеси, а также их комплексы [10]. Например, двухзарядным акцептором является медь, причем первый акцепторный уровень (Cu^-) располагается выше потолка

валентной зоны на 0,14–0,15 эВ, а второй – на 0,44 эВ [10]. В структуре 8-4-4 основной максимум НН2-огibaющей находится вблизи середины более узкой КЯ: в окрестности этой точки отношение квадратов модулей НН2- и НН1-огibaющих весьма велико (>400), и, если примесь (при расчетах использованы параметры Cu^-) находится в этой окрестности, вклад НН2-подзоны в формирование акцепторного состояния является определяющим. Напротив, если примесь находится в середине более широкой КЯ, где соответствующее отношение квадратов модулей огibaющих составляет менее 0,01, акцепторное состояние формируется, в основном, нижней подзоной. При наложении электрического поля $F \sim F_m$ огibaющие функции НН1- и НН2-подзон изменяются незначительно, поскольку их эффективная передислокация в структуре 8–4–4 начинается при $F \geq 60\text{кВ/см}$. Таким образом, электрическое поле фактически не влияет на энергию связи акцептора в широкой КЯ (кривая 1 на рисунке), но может приводить к исключительно сильной ее зависимости, когда примесь располагается в узкой КЯ (кривая 2). В области полей $F_m < F < F^*$ аппроксимация закона дисперсии простым выражением (4) в силу ограничения (5), естественно, использована быть не может. Соответствующим образом усложнив модель дырочного спектра, можно убедиться в том, что в этой области кривая 1 остается непрерывной, а кривая 2 достаточно быстро подходит к дну НН1-подзоны, как это показано пунктирными линиями на рисунке.

Указанная зависимость обусловлена исключительно перестройкой энергетического спектра дырок при наложении электрического поля, сопровождающейся возникновением сингулярности плотности состояний, типичной для 1D систем. Отметим, что энергия связи мелкого акцептора также весьма чувствительна к возникновению 1D сингулярностей плотности состояний дырок в асимметричных системах КЯ.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, МНТП России "Физика твердотельных наноструктур" и INTAS (грант 93-1704).

-
1. В.И.Белявский, Ю.В.Кобаев, Н.В.Корняков, С.В.Шевцов, Письма в ЖЭТФ 61, 1004 (1995).
 2. Y.-C.Chang, G.D.Sanders, and D.Z.-Y.Ting, *Excitons in Confined Systems*, Eds. R.Del Sole, A.D'Andrea, A.Lapicciarella (Springer Proc. in Physics, 25, Springer-Verlag, Berlin etc.), p.159.
 3. Ю.В.Кобаев, Письма в ЖЭТФ 47, 628 (1988).
 4. M.Altarelli, *Excitons in Confined Systems*, Eds. R.Del Sole, A.D'Andrea, A.Lapicciarella (Springer Proceedings in Physics, 25, Springer-Verlag, Berlin etc.), p.170.
 5. I.Galbrith and G.Duggan, *Phys. Rev.* B40, 5515 (1989).
 6. J.M.Luttinger, *Phys. Rev.* 102, 1030 (1956).
 7. Л.В.Келдыш Л.В., ЖЭТФ 45, 365 (1963).
 8. В.Г.Барьяхтар, А.Г.Квирикадзе, В.А.Попов, ЖЭТФ 59, 898 (1970).
 9. А.М.Косевич, *Теория кристаллической решетки (физическая механика кристаллов)*, Харьков, 1988.
 10. А.Милнс, *Примеси с глубокими уровнями в полупроводниках*, М.: Мир, 1977.