

ПРИМЕСНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА С УЧАСТИЕМ РЕЗОНАНСНЫХ СОСТОЯНИЙ МЕЛКИХ ДОНОРОВ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ

В. Я. Аleshкин, Л. В. Гавриленко*

*Институт физики микроструктур Российской академии наук
603950, Нижний Новгород, Россия*

Поступила в редакцию 27 ноября 2003 г.

Рассчитан энергетический спектр локализованных и резонансных состояний мелких доноров в гетероструктурах $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ с квантовыми ямами. Найдены величины ширины резонансных состояний, принадлежащих второй подзоне размерного квантования. Показано, что ширина резонансного уровня в основном определяется взаимодействием с оптическими фононами. Найден спектр примесного поглощения света, обусловленного электронными переходами с основного состояния донора в резонансные состояния, принадлежащие второй подзоне размерного квантования.

PACS: 73.20.Nb

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время наблюдается повышенный интерес к резонансным состояниям мелких примесных центров в полупроводниках. Этот интерес обусловлен возможностью использования резонансных состояний мелкой примеси для лазерной генерации длинноволнового ИК-излучения, которая была продемонстрирована в одноосно сжатом $p\text{-Ge}$ при приложении сильного электрического поля [1]. Естественно, возникли вопросы о возможности использования резонансных состояний в других объемных полупроводниках и гетероструктурах для получения стимулированного излучения и об оптимизации параметров уже существующих источников стимулированного излучения. Однако в объемных полупроводниках параметры резонансных состояний изменить достаточно сложно. В полупроводниках с квантовыми ямами (КЯ) возможно изменение параметров примесных состояний в широких пределах. Действительно, благодаря присутствию примеси в квантовой яме или рядом в барьере, кроме непрерывного параболического спектра подзон размерного квантования, появляются дискретные примесные уровни, параметры которых зависят как от положения

примеси, так и от характеристик КЯ. Примесные уровни, «связанные» со второй, третьей и т. д. подзонами размерного квантования, могут попасть в область непрерывного спектра энергий нижележащих подзон. В этом случае время жизни электрона в таких состояниях конечно и такие состояния называются квазистационарными или резонансными. К настоящему времени резонансные состояния мелких доноров в КЯ изучены слабо. Имеются расчеты, выполненные вариационным методом энергий ионизации и ширины уровней [2]. Отметим, что в работе [3] исследовались резонансные состояния доноров, находящихся в барьерах, в приближении конфигурационного взаимодействия и нулевого радиуса. Однако до сих пор рассеяние на фононах, которое в основном и определяет ширину резонансного уровня, не было учтено. Отсутствуют также вычисления коэффициентов поглощения излучения, обусловленного переходами электронов в резонансные состояния. Вероятно, отсутствие расчетов наблюдаемых свойств таких состояний является причиной отсутствия и систематического экспериментального их исследования.

В данной работе представлено теоретическое исследование резонансных состояний мелких доноров в квантовых ямах в гетероструктурах $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Изучена зависимость ширины

*E-mail: aleshkin@ipm.sci-nnov.ru

резонансных уровней и энергии ионизации резонансных состояний от положения примеси в КЯ. Рассчитан коэффициент поглощения излучения для дипольных оптических переходов электронов из основного донорного состояния, принадлежащего первой подзоне, в донорные состояния и непрерывный спектр второй подзоны. Показано, что ширина резонансного уровня и спектр примесного поглощения излучения, обусловленного переходами в резонансные состояния, определяются в основном рассеянием на оптических фононах, если оно не запрещено законами сохранения.

2. МОДЕЛЬ ДЛЯ РАСЧЕТА СОСТОЯНИЙ МЕЛКОГО ДОНОРА

Для описания состояний электрона в работе использовалось приближение эффективной массы. Закон дисперсии электрона полагался изотропным и квадратичным в плоскости квантовой ямы. Поляризация гетерограницы, обусловленная зарядами, не учитывалась из-за небольшой разницы в диэлектрических проницаемостях материалов квантовой ямы и барьера (далее будем рассматривать гетеросистему GaAs/Al_{0.2}Ga_{0.8}As). Разница эффективных масс электрона в GaAs и Al_{0.2}Ga_{0.8}As не учитывалась.

Для вычисления энергетического спектра состояний мелких доноров в КЯ был использован метод разложения по «плоским волнам», предложенный в работе [4] и развитый в [5]. Волновые функции резонансных состояний и состояний непрерывного спектра раскладывались в ряд по собственным функциям гамильтониана \hat{H}_0 для электрона в КЯ (без учета потенциала примеси):

$$\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2\mu + U(z), \quad (1)$$

здесь μ — эффективная масса электрона, потенциал $U(z)$ задает профиль КЯ и зависит от содержания алюминия в твердом растворе Al_xGa_{1-x}As [6]. Поскольку закон дисперсии электронов полагается изотропным в плоскости квантовой ямы, система обладает аксиальной симметрией, и сохраняется проекция углового момента на нормаль к КЯ (ось z) $L_z = \hbar m$. Волновая функция, соответствующая квантовому числу m , может быть представлена в виде [5]

$$\Psi^m(\rho, \varphi, z) = \exp(im\varphi) \sum_{n,k} \int_0^{2\pi} \frac{\sqrt{2} a_n^m(k)}{\sqrt{k} \pi^{1/4} S^{3/4}} \times \\ \times \exp(ik\rho \cos\theta + im\theta) \psi_n(z) d\theta, \quad (2)$$

где S — площадь КЯ, ρ, φ — полярные координаты, лежащие в плоскости КЯ, k — модуль двумерного волнового вектора также в плоскости КЯ, n — номер подзоны размерного квантования, $\psi_n(z)$ — нормированная волновая функция, описывающая движение электрона по оси z и удовлетворяющая уравнению Шредингера с гамильтонианом (1):

$$\hat{H}_0 \psi_n(z) \exp(i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho}) = \\ = \left(E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \right) \psi_n(z) \exp(i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho}), \quad (3)$$

где энергия E_n соответствует дну n -й подзоны. Отметим, что в разложении (2) мы опустили слагаемое, соответствующее вкладу непрерывного спектра. Это допущение справедливо в том случае, когда энергия связи описываемых донорных состояний много меньше глубины квантовой ямы и состояния локализованы внутри нее.

Чтобы найти коэффициенты разложения $a_n^m(k)$, подставляем волновую функцию в виде (2) в уравнение Шредингера с полным гамильтонианом

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + F, \quad F = -\frac{e^2}{\kappa \sqrt{\rho^2 + (z - z_{im})^2}}, \quad (4)$$

где κ — диэлектрическая проницаемость материала, e — заряд электрона, z_{im} — z -координата донора. Интегральное уравнение для коэффициентов разложения имеет вид

$$\left(E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \right) a_n^m(k) - \\ - \sum_{n'} \int_0^\infty dk' a_{n'}^m(k') I_{n,n'}^m(k, k') = \varepsilon a_n^m(k), \quad (5)$$

где ε — энергия электрона, ядро интегрального оператора задается соотношением

$$I_{n,n'}^m(k, k') = \frac{q^2}{2\pi\kappa} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\sqrt{kk'} \cos m\theta}{\sqrt{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta}} \times \\ \times \int_{-\infty}^\infty dz \exp\left\{-|z - z_{im}| \sqrt{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta}\right\} \times \\ \times \psi_n^*(z) \psi_{n'}(z).$$

Интегральное уравнение (5) можно решать методом конечных разностей, в котором интеграл по k' заменяется суммой. Каждое слагаемое этой суммы соответствует интегралу по k' в некотором интервале. Если этот интервал мал по сравнению с характерным масштабом изменения подынтегральной

функции, то интеграл по каждому из интервалов может быть заменен произведением величины интервала на значение подинтегральной функции в этом интервале. Будем использовать эквидистантное разбиение по k' с шагом Δk .

Если выбрать шаг по k' много меньше обратного боровского радиуса ($\Delta k \ll 1/r_B$), то подинтегральное выражение в (5) слабо меняется на одном шаге. Кроме того, в разложении (2) для локализованных и резонансных состояний функции $a_n^m(k)$ достаточно быстро убывают при больших k' (таких что $1/k'_{max} \ll r_B$), поэтому сумму по k' можно оборвать. Для выбранного разбиения по k' уравнение (5) можно переписать в виде

$$\sum_{n',j} a_{n'}^m(k_j) \left(\left(E_{n'} + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \right) \delta_{n',n} \delta_{i,j} - \Delta k I_{n,n'}^m(k_i, k_j) \right) = \varepsilon a_n^m(k_i). \quad (6)$$

Из равенства (6) видно, что задача свелась к нахождению собственных значений величин ε и собственных векторов $a_n^m(k)$ симметричной действительной матрицы

$$A_{n,i;n',j}^m = \left(\varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k_i^2}{2\mu} \right) \delta_{n',n} \delta_{i,j} - \Delta k I_{n,n'}^m(k_i, k_j). \quad (7)$$

Собственные значения и векторы матрицы A^m определяют энергетический спектр и волновые функции локализованных и делокализованных состояний. Коэффициенты разложения волновой функции удовлетворяют нормировочному соотношению

$$\sum_{n,i} |a_n^m(k_i)|^2 = 1.$$

Отметим, что ядро $I_{n,n'}^m(k, k')$ имеет сингулярность при $k = k'$. В работе [4] предложен метод устранения этой трудности. Он состоит в том, что при замене интеграла на сумму следует учитывать конечность интеграла в любом интервале, несмотря на стремление подинтегральной функции к бесконечности. Поэтому при замене интеграла на сумму следует брать усредненное по Δk значение $I_{n,n'}^m(k, k')$. В этом случае матрица A^m может быть представлена в виде

$$A_{n,i;n',i}^m = \delta_{n,n'} \left\{ \varepsilon_n(k_i) - \frac{q^2 \Delta k}{\pi \kappa} \sqrt{\pi} \right\} - \frac{q^2 \Delta k}{\pi \kappa} \times \\ \times \int_{\Delta k/2k_i}^{\pi} d\theta \frac{\cos m\theta}{\sqrt{2(1 - \cos \theta)}} \int_{-\infty}^{\infty} dz \times \\ \times \exp \left\{ -|z - z_i| k_i \sqrt{2(1 - \cos \theta)} \right\} \psi_{n'}^*(z) \psi_n(z) \quad (8)$$

и матричные элементы $A_{n,i;n',i}^m$ конечны.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА И ВРЕМЕНИ ЖИЗНИ РЕЗОНАНСНЫХ СОСТОЯНИЙ

Вычисления параметров резонансных состояний были проведены для гетероструктуры $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ с КЯ шириной $d_{QW} = 150 \text{ \AA}$. Квантовая яма содержит три энергетических уровня (подзоны размерного квантования) с энергиями равными $E_1 = 15.8 \text{ мэВ}$, $E_2 = 62.5 \text{ мэВ}$, $E_3 = 136.8 \text{ мэВ}$, отсчитываемыми от дна зоны проводимости GaAs. Для нахождения резонансных уровней мелкого донора использовалась диагонализация матрицы 3000×3000 (три подзоны, 1000 точек по k) и $\Delta k = 4 \cdot 10^{-5} \text{ \AA}^{-1} = 4 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$, в ходе которой одновременно находятся собственные векторы и собственные значения. Качественно полученные ниже результаты будут справедливы для квантовых ям с шириной менее 200 \AA . Для более широких квантовых ям взаимодействие электронов с оптическими фононами не влияет на ширину резонансных уровней.

Резонансные состояния, принадлежащие n -й подзоне, легко найти, проанализировав зависимость вероятности нахождения электрона в данной подзоне от его энергии (при заданном m):

$$B_n^m(\varepsilon) = \sum_i |a_n^m(k_i)|^2 / k_i. \quad (9)$$

На рис. 1 показана зависимость $B_2^0(\varepsilon)$, соответствующая положению донора $z_{im} = 0.3d_{QW}$ ($z_{im} = d_{QW}$ и $z_{im} = 0$ соответствуют границам КЯ). На рисунке видны четыре пика на этой зависимости с энергиями меньшими $E_2 = 62.5 \text{ мэВ}$, соответствующие резонансным состояниям, принадлежащим второй подзоне размерного квантования. При энергиях больших E_2 видны смешанные кулоновским потенциалом примеси состояния непрерывного спектра первой и второй подзон. Доля третьей подзоны в волновых функциях этих резонансных состояний порядка 10^{-5} . Поэтому доля состояний непрерывного спектра должна быть также мала. Отметим, что используемая для расчета модель плохо описывает сильно возбужденные резонансные и локализованные состояния, характерный размер орбиты которых больше $1/\Delta k$. Поэтому при увеличении точности вычислений число рассчитанных резонансных состояний увеличивается. Использованный набор значений k_i позволяет разрешить четыре резонансных состояния. Однако, как мы покажем ниже, ширина резонансов из-за взаимодействия с оптическими фононами составляет около 2 мэВ . Поэтому все резонанс-

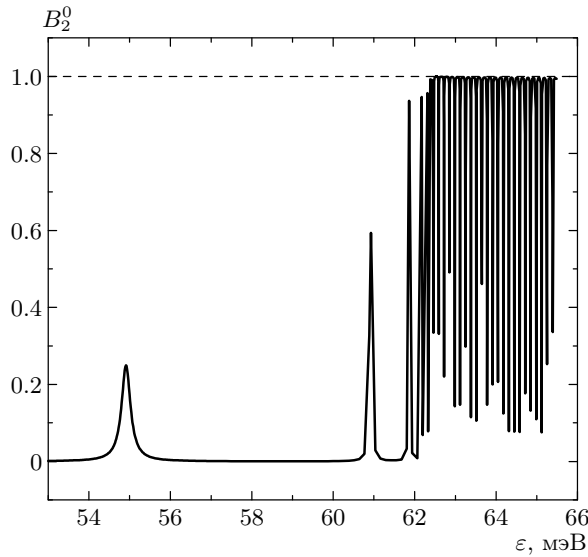


Рис. 1. Зависимость вероятности нахождения электрона во второй подзоне от его энергии ($m = 0$). Пики в области энергий меньших 62.5 мэВ соответствуют резонансным донорным состояниям электрона. При энергиях $\epsilon > 62.5$ мэВ начинается непрерывный спектр второй подзоны размерного квантования

ные состояния, кроме первого, плохо определены, поскольку энергия связи этих состояний меньше их ширины. Зависимость $B_2^m(\epsilon)$ вблизи пика лоренцева [7]:

$$B_2^m(\epsilon) = \frac{A}{(\epsilon - \epsilon_{2,s}^m)^2 + (\Gamma_{2,s}^m)^2/4}, \quad (10)$$

где $\epsilon_{2,s}^m$ — энергия s -го резонансного уровня второй подзоны, $\Gamma_{2,s}^m$ — его ширина, обусловленная взаимодействием состояний подзон в присутствии донора («кулоновская» ширина), A — нормировочная константа, которая зависит от числа точек по k . Величины $\Gamma_{2,s}^m$ можно найти из зависимости $B_2^m(\epsilon)$ в окрестности максимума, например, определяя по трем точкам величины A , $\epsilon_{2,s}^m$ и $\Gamma_{2,s}^m$. Для нахождения $\epsilon_{2,s}^m$, $\Gamma_{2,s}^m$ может быть также использован метод, описанный Фано [7]. Для этого необходимо решить уравнение Шредингера в пренебрежении межподзонами элементами кулоновского взаимодействия (положить $A_{n,i;n',i}^m = 0$ для $n \neq n'$), а затем воспользоваться выражениями [7]

$$\epsilon_{2,s}^m = E_{2,s}^m + P \int dE \frac{|F_{2,s;1}^m(E)|^2}{E_{2,s}^m - E} G_1(E), \quad (11)$$

$$\Gamma_{2,s}^m = 2\pi \int dE |F_{2,s;1}^m(E)|^2 \delta(E - E_{2,s}^m) G_1(E), \quad (12)$$

где $E_{2,s}^m$ — энергия s -го локализованного состояния второй подзоны, из которого происходит резонанс-

ное состояние, $F_{2,s;1}^m(E)$ — межзонный матричный элемент оператора F , вычисленный для s -го локализованного состояния второй подзоны и делокализованного состояния первой подзоны, имеющего энергию E ; $G_1(E)$ — одномерная плотность состояний первой подзоны с проекцией момента импульса на ось z равной $\hbar m$. Символ $P \int$ обозначает интеграл в смысле главного значения. Следует иметь в виду, что равномерное разбиение по k почти эквивалентно нулевым граничным условиям при $\rho = R = \pi/\Delta k$. Полная эквивалентность была бы, если бы в качестве точек по k брались бы корни функции Бесселя $J_m(kR)$. Однако корни с большими номерами располагаются примерно равномерно, и если характерный размер боровского радиуса мал по сравнению с Δk^{-1} , то ошибка, связанная с равномерным разбиением по k , мала. В этом случае для одномерной плотности состояний справедливо следующее выражение:

$$G_1(E) = \sqrt{2\mu}/\hbar\Delta k \sqrt{E - E_1}.$$

Энергия $E_{2,s}^m$ находится решением уравнения Шредингера в пренебрежении межподзонами элементами кулоновского взаимодействия. При получении формул (11), (12) из результатов работы [7] мы полагаем, что матричный элемент $F_{2,s;1}^m(E)$ слабо меняется на масштабе энергий $\Gamma_{2,s}^m$. Отметим, что равенство (11) соответствует формуле нахождения энергии во втором порядке возмущений по F , а (12) — золотому правилу квантовой механики для нахождения вероятности перехода под воздействием возмущения F .

На рис. 2 приведены зависимости «кулоновской» ширины нижнего резонансного донорного состояния ($m = 0$), принадлежащего второй подзоне, вычисленные двумя описанными способами. На рисунке видно, что результаты хорошо согласуются для величин ширины уровня более 0.1 мэВ. Для меньших величин первый способ имеет большую погрешность при использованном Δk , поскольку ширина уровня становится сравнимой с расстоянием между энергетическими уровнями, полученными в ходе вычислений для состояний сплошного спектра. Так, например, для примеси, расположенной в центре КЯ, ширина резонансного уровня стремится к нулю и стационарный метод разложения по плоским волнам дает некорректные результаты (эта точка на рис. 2 отмечена стрелкой). Поэтому для вычисления ширины возбужденных донорных резонансных уровней использовался второй метод.

Зависимость энергии ионизации и «кулоновской» ширины резонансных уровней от положения примеси z_{im} приведены на рис. 3. Отрицательным

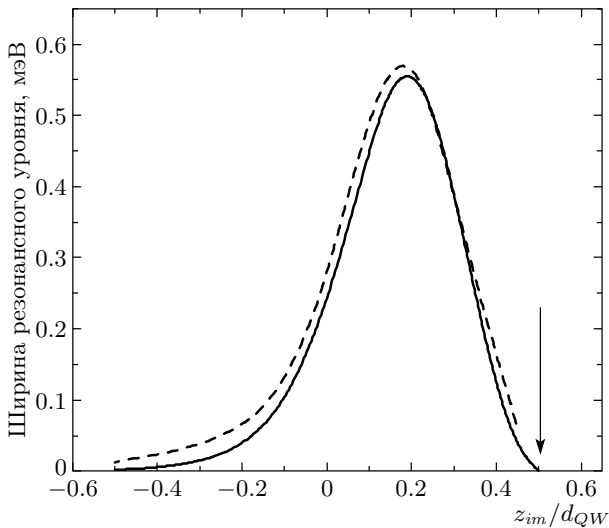


Рис. 2. Сравнение ширин нижнего резонансного уровня, вычисленных по теории возмущений (сплошная линия) и при помощи аппроксимации пика плотности вероятности функцией Лоренца (штриховая). По оси абсцисс отложено относительное положение примеси z_{im}/d_{QW} , где d_{QW} — ширина КЯ

значениям z_{im}/d_{QW} соответствует положение донора в барьере. На рисунке видно, что энергии ионизации резонансных состояний, связанных со второй подзоной, имеют локальный минимум при $z_{im} = 0.5d_{QW}$. Это связано с тем, что волновая функция второй подзоны обращается в нуль в центре КЯ. Поэтому электрон, находящийся во второй подзоне, слабее «чувствует» притягивающий потенциал примеси, расположенной в центре квантовой ямы.

«Кулоновская» ширина резонансного уровня, принадлежащего второй подзоне, обращается в нуль, когда примесь находится в центре КЯ, т.е. состояние становится локализованным. Примесь, расположенная в центре КЯ, не нарушает симметрии потенциала, а это значит, что четность сохраняется и переходы между первой и второй подзонами невозможны. При малых смещениях донора от центра КЯ ширина резонансного уровня зависит от смещения квадратично, поскольку в этом случае недиагональные по подзонам матричные элементы $A_{n,i;n'i}^m$ линейно зависят от смещения. Отметим, что «кулоновская» ширина нижнего резонансного уровня, рассчитанная для такой же структуры вариационным методом [2], примерно на 20 % больше полученной в этой работе.

Для проверки точности вычислений были прове-

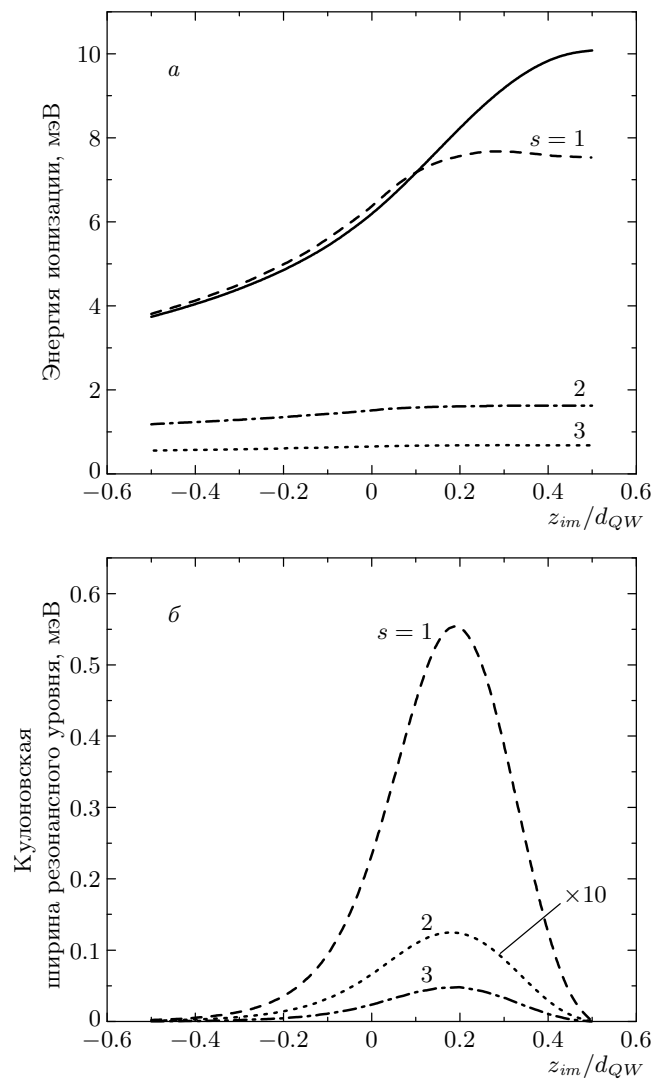


Рис. 3. а) Зависимость энергии ионизации от положения примеси в КЯ. Основное состояние донора (сплошная линия), резонансные состояния, принадлежащие второй подзоне: первое (штриховая линия), второе (штрихпунктир), третье (пунктир). б) «Кулоновская» ширина резонансных уровней в зависимости от положения примеси в КЯ. Для наглядности ширина третьего резонансного уровня увеличена в 10 раз

дены расчеты параметров резонансных уровней при $z_{im} = 0.3d_{QW}$ с использованием 1500 точек в каждой зоне и $\Delta k = 2.7 \cdot 10^{-5} \text{ \AA}^{-1} = 2.7 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$. Результаты отличались от таковых при использовании 1000 точек в каждой подзоне не более чем на 2–3 % для энергий ионизации и не более чем на 10 % для величин ширины резонансных уровней.

4. РАССЕЯНИЕ НА ПОЛЯРНЫХ ОПТИЧЕСКИХ ФОНОНАХ

Полная ширина резонансного уровня определяется не только уходом электрона из резонансного состояния за счет взаимодействия подзон через кулоновский потенциал примеси. Другим важным механизмом уширения резонансных уровней доноров является взаимодействие с фононами. Мы будем интересоваться случаем низких температур, когда основную роль в рассеянии играют процессы спонтанного испускания фононов. Для не слишком широких квантовых ям, в которых энергетический зазор между нижним резонансным уровнем, принадлежащим второй подзоне, и дном первой подзоны превышает энергию оптического фонона, основным механизмом рассеяния является испускание оптических фононов. Взаимодействие электронов с акустическими фононами заметно более слабое. Поэтому мы будем рассматривать рассеяние только на оптических фононах. Рассеяние, так же как и кулоновское взаимодействие между состояниями подзон, приводит к увеличению ширины резонансного уровня.

Хорошо известно, что рассеяние электронов на деформационных оптических фононах в Γ -долине в GaAs не может происходить из-за высокой симметрии последней [8], поэтому мы учитываем только взаимодействие электронов с полярными оптическими (РО) фононами. При этом оптические фононы будем полагать соответствующими объемному GaAs. Благодаря испусканию РО-фонона электрон, находящийся в резонансном состоянии, может перейти в непрерывный спектр первой подзоны. Далее мы покажем, что ширина резонансного уровня, обусловленная взаимодействием с РО-фононами, существенно превышает «кулоновскую» ширину.

Матричный элемент оператора спонтанного испускания полярного фонона в нашем описании зависит от квантовых чисел m_i и m_f , характеризующих волновые функции соответственно начального и конечного состояний:

$$V_{m_i m_f}(q) = \left(\frac{2\pi e^2}{\bar{\kappa} V} \hbar \omega_{LO} \right)^{1/2} \times \int (\Psi^{m_i}(\mathbf{r}))^* \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})}{q} \Psi^{m_f}(\mathbf{r}) d^3 r, \quad (13)$$

где V — объем кристалла, $\hbar \omega_{LO}$ — энергия продольного оптического фонона, q — волновой вектор фонона, $1/\bar{\kappa}$ — разность обратных диэлектрических проницаемостей материала на малой и высокой частотах:

$$\frac{1}{\bar{\kappa}} = \frac{1}{\kappa_0} - \frac{1}{\kappa_\infty}. \quad (14)$$

В качестве волновых функций начального и конечного состояний можно взять волновые функции, вычисленные в пренебрежении возможностью ухода электрона из резонансных состояний за счет кулоновского взаимодействия. Поскольку процессы рассеяния на РО-фононах учитываются по теории возмущений, общая частота переходов (с учетом рассеяния и резонансных переходов) будет в линейном приближении суммой соответствующих частот.

С учетом сделанных упрощений, проинтегрировав по углу $d\varphi$ в r -пространстве, можно записать (13) в виде

$$V_{m_i m_f}(q) = \left(\frac{2\pi e^2}{\bar{\kappa} V} \hbar \omega_{LO} \right)^{1/2} 2\pi(i)^{m_i - m_f} \times \int \phi_2^{m_i}(\rho) \frac{J_{m_f - m_i}(q_\perp \rho)}{\sqrt{q_\perp^2 + q_z^2}} \phi_1^{m_f}(\rho) \rho d\rho \times \int \psi_1(z) \exp(iq_z z) \psi_2(z) dz, \quad (15)$$

где $\phi_n^m(\rho)$ — радиальная часть волновой функции (нижний индекс задает номер подзоны, верхний — квантовое число m), q_\perp и q_z — компоненты волнового вектора фонона, соответственно перпендикулярная и параллельная оси z .

Отметим, что проекция момента импульса фонона на ось z равна разности проекций моментов импульса конечного и начального состояний электрона, поскольку в процессе рассеяния сохраняется полная проекция момента импульса на ось z всей электрон-фононной системы. Проекция момента импульса электрона ($L_z = \hbar m$) может изменяться при таком рассеянии. Поэтому при подсчете вероятности ухода электрона из состояния i с испусканием фонона необходимо просуммировать по всем квантовым числам конечных состояний, в том числе по m_f , а также по q . В дальнейших выкладках квантовое число начального состояния m_i считается равным нулю и соответствующий индекс опускается. Этот частный случай интересен из-за возможности применения полученных результатов для вычисления спектра коэффициента поглощения.

Частота переходов из s -го резонансного состояния под второй подзоной в непрерывный спектр первой описывается выражением

$$\nu_{sc}^s = \frac{2\pi}{\hbar} G_1(\varepsilon_{res}^{2,s} - \hbar \omega_{LO}) \times \sum_{m_f} \frac{V}{(2\pi)^3} \int |V_{m_f}^s(q)|^2 d^3 q. \quad (16)$$

Интеграл по $d^3 q$ от квадрата матричного элемента

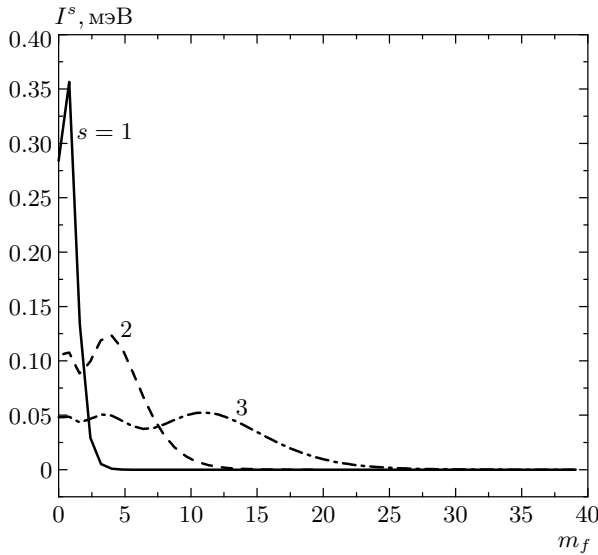


Рис. 4. Зависимость $I^s(m_f)$ для $z_{im} = 0.35d_{QW}$. Физический смысл имеют только целые значения проекции момента импульса m_f . Резонансные состояния, принадлежащие второй подзоне: первое (сплошная линия), второе (штриховая линия), третье (штрихпунктир)

удобно взять численно. Для «фононной» ширины уровня получим следующее выражение:

$$\hbar\nu_{sc}^s = \sum_{m_f=-\infty}^{\infty} I^s(m_f), \quad (17)$$

где

$$I^s(m_f) = G_1(\varepsilon_{res}^{2,s} - \hbar\omega_{LO}) \frac{V}{(2\pi)^2} \int |V_{m_f}^s(q)|^2 d^3q.$$

Кроме того, $I^s(m_f) = I^s(-m_f)$, что позволяет записать

$$\hbar\nu_{sc}^s = I^s(0) + 2 \sum_{m_f=1}^{\infty} I^s(m_f). \quad (18)$$

Зависимости интеграла $I^s(m_f)$ от m_f для различных значений s приведены на рис. 4 для $z_{im} = 0.35d_{QW}$.

На рис. 4 видно, что, во-первых, для $s = 1$ функция $I^s(m_f)$ убывает наиболее быстро и, во-вторых, число максимумов $I^s(m_f)$ соответствует номеру s . Энергия ионизации s -го резонансного состояния убывает с ростом s (для атома водорода $E_{ion} \propto 1/s^2$), а радиус локализации возрастает. С ростом радиуса локализации волновой функции зависимость $I^s(m_f)$ от m_f становится более плавной. Поэтому ясно, что зависимость $I^s(m_f)$ ослабевает и по мере смещения примеси от центра квантовой

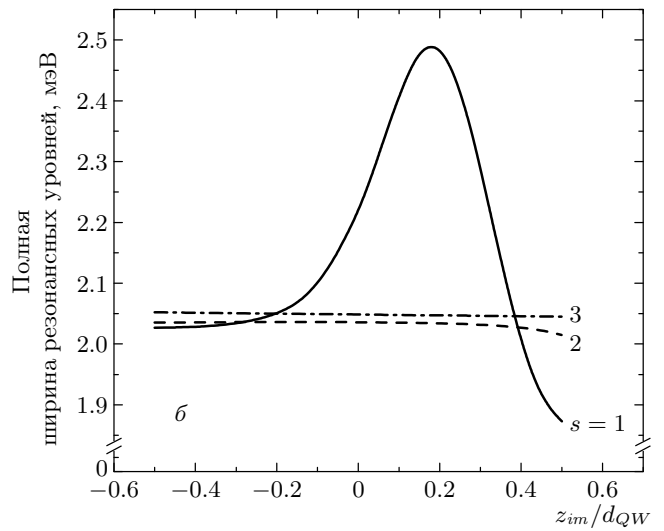
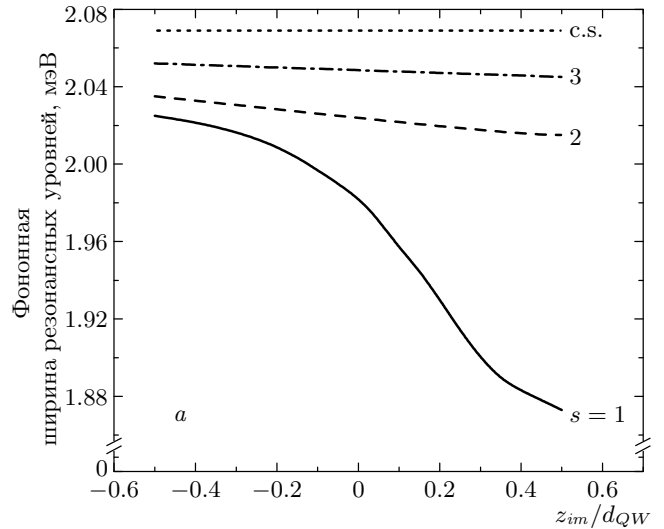


Рис. 5. а) Зависимость «фононной» ширины резонансных уровней от положения примеси в КЯ. Обозначения: $s = 1$ — ширина первого резонансного уровня (принадлежащего второй подзоне), $s = 2$ — второго, $s = 3$ — третьего, c.s. — уширение состояний непрерывного спектра на дне второй подзоны. б) Полная ширина резонансных уровней в зависимости от положения примеси в КЯ

ямы, поскольку при этом возрастает радиус локализации. При удалении примеси в барьер полная вероятность рассеяния стремится к таковой для свободного электрона, что видно на рис. 5, на котором приведены зависимости «фононной» и полной ширин резонансных уровней от положения донора. Отметим, что для свободных электронов в подзоне размерного квантования зависимость $I^s(m_f)$ вообще отсутствует для всех возможных значений m_f .

Из сравнения рис. 3б и рис. 5а видно, что основной вклад в уширение резонансных уровней вносит процесс рассеяния на РО-фононах.

Оценки величин уширения резонансного уровня, связанного с взаимодействием с акустическими фононами, дают значения 0.002 мэВ для рассеяния на деформационном акустическом потенциале и 0.0004 мэВ для рассеяния на пьезоэлектрическом акустическом потенциале. Эти величины много меньше «кулоновской» ширины резонансного уровня и в дальнейшем учитываться не будут.

5. ДИПОЛЬНЫЕ ПЕРЕХОДЫ ЭЛЕКТРОНОВ

Поскольку резонансные состояния часто наблюдаются экспериментально с помощью измерений спектров примесного поглощения, интересно рассчитать коэффициент поглощения для дипольных оптических переходов электронов из основного донорного состояния во вторую подзону, в том числе в резонансные состояния. Важную роль в спектрах поглощения играют однородное и неоднородное уширения линии перехода. Если начальным состоянием электрона является основное состояние донора, а конечным состоянием после поглощения фотона является резонансное состояние, то однородное уширение определяется полной шириной резонансного уровня. Неоднородное уширение определяется распределением примеси по координате. Для рассматриваемой структуры величина однородного уширения линии поглощения составляет около 1 мэВ (половина ширины резонансного уровня). На рис. 3 видно, что для обеспечения такой ширины линии за счет неоднородного уширения в случае, когда средняя координата примеси соответствует центру КЯ, дисперсия положения примеси должна быть около 30 Å. Мы будем полагать, что дисперсия положения примеси меньше этой величины, и поэтому пренебрежем неоднородным уширением.

Волновая функция примесного состояния сформирована в большей степени состояниями самой близкой по энергии подзоны. Поэтому правила отбора для дипольных переходов электронов между основным донорным состоянием и резонансными состояниями будут почти такими же, как для переходов из первой подзоны в подзону, формирующую данные резонансные состояния. Таким образом, вероятность переходов электронов в резонансные состояния, принадлежащие второй подзоне, будет максимальной под действием излучения, поляризованного по оси z . Но для излучения, поля-

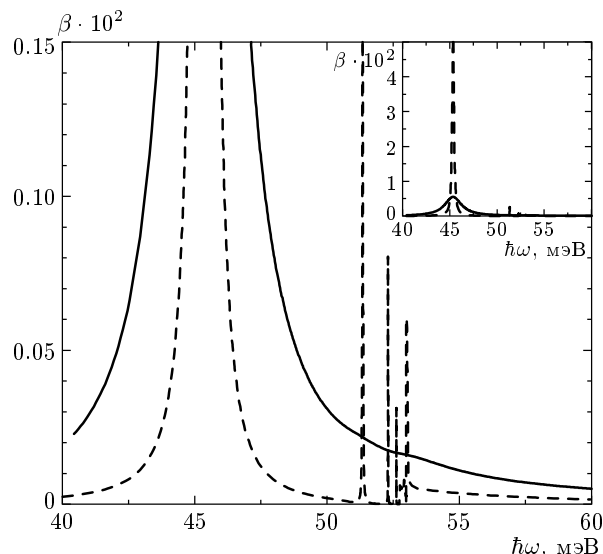


Рис. 6. Спектр коэффициента поглощения (сплошная линия — с учетом рассеяния на РО-фононах, штриховая — без учета процессов рассеяния). На вставке показано соотношение амплитуд основных пиков

ризованного в плоскости КЯ (плоскость xy), переходы не будут полностью запрещены, так как волновые функции резонансных состояний содержат также малые вклады далеких подзон. Кроме того, x -, y -поляризованное излучение будет вызывать переходы между состояниями, принадлежащими одной подзоне. Тогда как под действием z -поляризованного излучения внутривозонные переходы запрещены для электрона с параболическим изотропным законом дисперсии. В дальнейшем мы рассматриваем только переходы под действием излучения, поляризованного по оси z , поскольку вероятность таких переходов многократно превышает вероятность переходов с x -, y -поляризацией.

Электрическое поле, направленное вдоль оси z , не нарушает аксиальной симметрии, поэтому при дипольных оптических переходах проекция углового момента на ось z сохраняется. Вероятность таких переходов между основным донорным состоянием и состояниями второй подзоны описывается формулой

$$W(\hbar\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} q^2 E^2 |z_{if}|^2 G_1(\hbar\omega - \varepsilon_{gs}), \quad (19)$$

где z_{if} — матричный элемент оператора \hat{z} между начальным и конечным состояниями, E — амплитуда электрического поля, $\hbar\omega$ — энергия фотона, ε_{gs} — энергия основного донорного состояния. Безразмер-

ный коэффициент поглощения пропорционален вероятности дипольных переходов

$$\beta(\hbar\omega) = \frac{2\pi W(\hbar\omega)\hbar\omega N}{cE^2 n}, \quad (20)$$

где c — скорость света, N — планарная концентрация примеси, которую мы будем считать равной $3 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ (при такой концентрации примеси в квантовой яме наблюдаются даже D^- -центры [9]), n — коэффициент преломления. Обычный размерный коэффициент поглощения для излучения, распространяющегося вдоль КЯ, получается из (20) делением на толщину КЯ.

На рис. 6 для сравнения приведены спектры безразмерного коэффициента поглощения $\beta(\hbar\omega)$ для дипольных оптических переходов электронов с учетом и без учета процессов рассеяния (для положения примеси $z_{im} = 0.35d_{QW}$).

Видно, что рассеяние существенным образом уменьшает амплитуду главного пика, который соответствует переходу электрона из основного состояния, принадлежащего первой подзоне, в нижнее резонансное состояние, принадлежащее второй подзоне. Поскольку плотность состояний, определяющая максимум лоренцевой линии, равна $G_{max} = 2/\pi\Gamma$, амплитуда пика поглощения обратно пропорциональна ширине уровня, на который совершается переход. Второстепенные пики и плато непрерывного спектра едва различимы на «хвосте» основного пика.

Отметим, что форма линии поглощения при переходе электрона из основного состояния донора в нижнее резонансное состояние под действием поля с z -поляризацией лоренцева. Этот факт является следствием того, что матричный элемент оператора z для переходов из основного состояния донора в состояния первой подзоны равен нулю. В противном случае на спектре поглощения вблизи резонанса имелся бы нуль [7].

Как видно на рис. 6, величина поглощения составляет около половины процента. Это означает, что для структуры, содержащей пять–десять таких квантовых ям, эффект может быть легко наблюдаемым при использовании в эксперименте геометрии полного внутреннего отражения, которая обычно применяется для наблюдения межподзонного поглощения [10].

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Резюмируя результаты проведенных вычислений, можно сделать следующие выводы. Переход электронов с основного состояния донора в нижнее резонансное состояние, принадлежащее второй подзоне, определяет примесное поглощение света с энергией фотонов, соответствующей межподзонным переходам, в условиях вымораживания электронов в гетероструктурах GaAs/Al_xGa_{1-x}As. Форма линии поглощения, соответствующая этому переходу, лоренцева. Ширина линии поглощения определяется в основном взаимодействием электронов с оптическими фононами. Величина безразмерного коэффициента поглощения в максимуме для планарной концентрации доноров $3 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ составляет около половины процента.

Авторы выражают благодарность А. М. Сатанину за полезные дискуссии. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 01-02-16106, 04-02-17178), МНТЦ (грант № 2293), гранта УР.01.01.057, Министерства промышленности, науки и технологии (контракты 40.072.1.1.1173 и 40.031.1.1.1187).

ЛИТЕРАТУРА

1. И. В. Алтухов, М. С. Каган, К. А. Королев и др., ЖЭТФ **115**, 89 (1999).
2. S. T. Yen, Phys. Rev. B **66**, 075340 (2002).
3. A. Blom, M. A. Odnobyudov, I. N. Yassievich et al., Phys. Rev. B **65**, 155302 (2002).
4. J. P. Loehr and J. Singh, Phys. Rev. B **41**, 3695 (1990).
5. В. Я. Алешкин, Б. А. Андреев, В. И. Гавриленко и др., ФТП **34**, 582 (2000).
6. E. H. Li, Physica E **5**, 215 (2000).
7. U. Fano, Phys. Rev. **124**, 1866 (1961).
8. В. Ф. Гантмахер, И. Б. Левинсон, *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках*, Наука, Москва (1984).
9. S. R. Ryu, Z. X. Jiang, W. J. Li et al., Phys. Rev. B **54**, R11086 (1996).
10. B. F. Levine, J. Appl. Phys. **74**, R1 (1993).