

Электронный спектр и оптические переходы в сверхрешетках с квазилокализованными состояниями в элементарной ячейке

А.В.Дмитриев, В.В.Макеев

Аннотация

Исследована структура электронного спектра и рассчитан дипольный матричный элемент межподзонных переходов в сверхрешетке, в элементарной ячейке которой имеются квазилокализованные состояния электронов. Получено дисперсионное соотношение и найдена зонная структура такой сверхрешетки. Волновые функции и электронный спектр обладают своеобразными гибридными свойствами вблизи энергии, соответствующей квазилокализованному состоянию в одиночной квантовой яме. Коэффициент поглощения гетероструктуры в этой области значительно увеличивается.

1. Введение

Долгое время считалось общепризнанным, что в полупроводниках, как и вообще в кристаллах, могут существовать или блоховские зонные электронные состояния, или локализованные состояния, лежащие в запрещенной зоне. В последнее время, однако, выяснилось, что во многих обстоятельствах играют важную роль состояния третьего типа: резонансные или квазилокализованные [1]. Эти состояния, давно известные в оптике [2] и в квантовой механике [3], в полупроводниках возникают, например, когда примесный уровень, отщепленный от одной разрешенной зоны, оказывается на фоне другой или когда глубокий примесный уровень попадает на фон разрешенной зоны. При определенных условиях резонансные состояния могут оказывать

существенное влияние на кинетические процессы в полупроводнике [4, 5].

Квазилокализованные состояния могут возникать и в искусственных полупроводниковых структурах, например, двухбарьерных. В работе [6] было показано, что они отчетливо проявляются в оптических свойствах таких структур, заметно увеличивая коэффициент их межподзонного поглощения в области частот, соответствующих переходу в резонансное состояние. Поскольку последнее формально принадлежит континууму и де локализовано, можно ожидать, что не потребуется приложения сильного электрического поля, чтобы электрон, перешедший в квазилокализованное возбужденное состояние, дал вклад в фототок. Это делает гетероструктуры с квазилокализованными состояниями весьма привлекательными для конструирования приемников ИК-излучения. Их особенностью должно быть сочетание селективности поглощения с малым темновым током за счет работы в небольшом электрическом поле. Такое сочетание трудно достижимо в традиционных ИК-фотоприемниках на гетероструктурах, в которых используются переходы или в локализованное состояние или, наоборот, в континуум (см. обзор [7]).

В цитированной работе [6] были, фактически, рассмотрены свойства уединенной квантовой ямы. В то же время для экспериментального исследования и для практических применений всегда используются или массивы квантовых ям, или сверхрешетки, а поэтому представляет интерес изучить свойства периодических структур, составленных из квантовых ям с резонансными состояниями. Выяснение особенностей взаимодействия резонансных состояний, принадлежащих различным квантовым ямам, а также взаимодействия между ними и континуумом в таких условиях представляет и самостоятельный теоретический интерес. Эта задача будет исследована в настоящей статье.

Теоретический формализм для расчета электронного спектра сверхрешеток достаточно хорошо развит (см., например, [8, 9]). В работе [10] проведен детальный анализ спектра традиционной

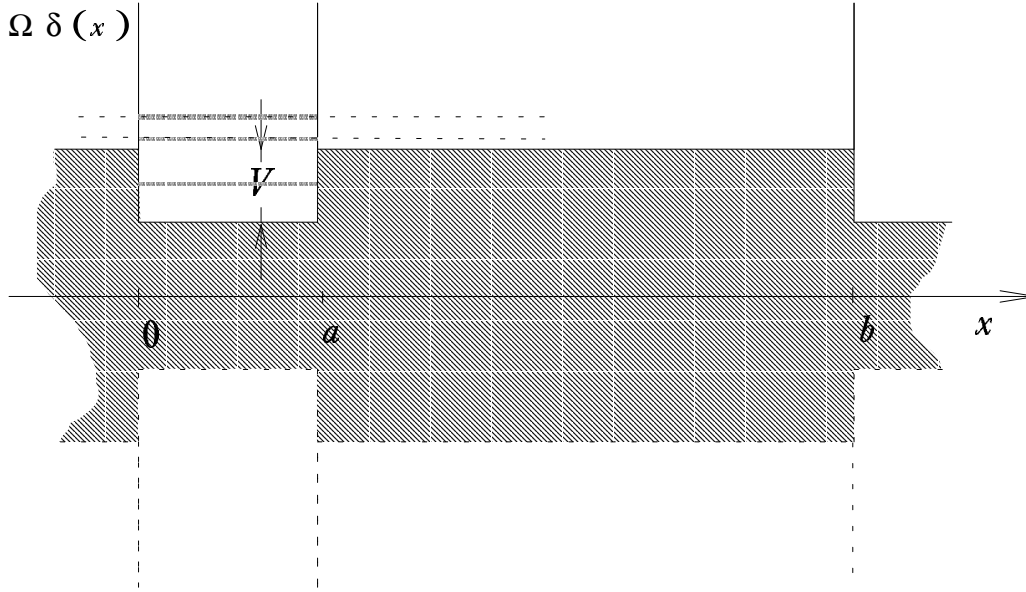


Рис. 1. Рассмотренный модельный потенциал. Схематически изображено положение первых минизон. Предполагается, что одна блоховская минизона расположена ниже уровня основных барьеров, а остальные выше них (показаны две).

сверхрешетки типа АВ (два чередующихся слоя). Мы используем здесь аналогичный метод для анализа спектра сверхрешетки с более сложным строением элементарной ячейки.

2. Модель

В работе рассмотрена одна невырожденная зона — для определенности, зона проводимости — композиционной сверхрешетки, каждая элементарная ячейка которой описывается в рамках метода эффективной массы одномерным модельным потенциалом следующего вида (см. также рис. 1):

$$U(x) = \left\{ \begin{array}{ll} -V, & 0 < x < a \\ 0, & a < x < b \end{array} \right\} + \Omega [\delta(x) + \delta(x - a)]. \quad (1)$$

Здесь x — направление роста сверхрешетки, a и b — ширина ям и период структуры, соответственно, V — глубина ямы.

δ -образные барьеры по краям ямы служат упрощенной аппроксимацией дополнительных барьеров конечной высоты и толщины, окружающих каждую яму, помимо основных барьеров толщиной $(b - a)$, которые разделяют ямы. Обратная туннельная прозрачность этих дополнительных барьеров характеризуется параметром Ω . Энергия в (1) отсчитывается от верха основного барьера.

Если бы вся структура состояла только из одной квантовой ямы с потенциалом (1), можно было бы действительно говорить о наличии в ее спектре квазилокализованных состояний. Эти состояния возникают вблизи тех энергий, где располагались бы локализованные размерно-квантованные состояния между окружающими яму дополнительными барьерами, будь последние непрозрачны. Конечная проницаемость этих барьеров превращает локализованные состояния, лежащие выше основного барьера, в резонансные. На рис. 1 им отвечают два верхних уровня в яме, тогда как нижний в одиночной яме является локализованным.

Рассмотрим теперь, как наличие резонансных состояний в ямах отражается на свойствах структуры в целом. Огибающие волновых функций в гетероструктуре можно представить в виде

$$\Psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{iqx} + A_2 e^{-iqx}, & 0 < x < a; \\ B_1 e^{i\kappa x} + B_2 e^{-i\kappa x}, & a < x < b; \end{cases} \quad (2)$$

$$\Psi(x + b) = e^{ikb} \Psi(x),$$

где $q = (1/\hbar)\sqrt{2m(E + V)}$, $\kappa = (1/\hbar)\sqrt{2mE}$, E — энергия частицы, отсчитанная от верха основного барьера, m — эффективная масса, kb — сдвиг фазы огибающей функции при смещении на один период сверхрешетки. Пренебрегая различиями эффективной массы в слоях гетероструктуры, получим обычным образом граничное условие на левой границе ямы ($x = 0$) в виде

$$\begin{cases} \Psi(x)|_{0^-}^{0^+} = 0, \\ \frac{d}{dx} \ln \Psi(x)|_{0^-}^{0^+} = \Omega. \end{cases}$$

Добавив аналогичные граничные условия на правой границе ($x =$

a), получим из них систему уравнений для коэффициентов в выражении (2), определяющем огибающую функцию:

$$\begin{pmatrix} e^{ikb} & e^{ikb} & -e^{i\kappa b} & -e^{-i\kappa b} \\ (q + i\Omega)e^{ikb} & (-q + i\Omega)e^{ikb} & -\kappa e^{i\kappa b} & \kappa e^{-i\kappa b} \\ e^{iqa} & e^{-iqa} & -e^{i\kappa a} & -e^{-i\kappa a} \\ (-q + i\Omega)e^{iqa} & (q + i\Omega)e^{-iqa} & \kappa e^{i\kappa a} & -\kappa e^{-i\kappa a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} = 0.$$

Условие равенства нулю определителя матрицы коэффициентов в этом уравнении дает дисперсионное соотношение:

$$\begin{aligned} \cos kb = & \frac{\Omega^2 - q^2 - \kappa^2}{2\kappa q} \sin \kappa(b - a) \sin qa + \frac{\Omega}{q} \cos \kappa(b - a) \sin qa + \\ & + \frac{\Omega}{\kappa} \sin \kappa(b - a) \cos qa + \cos \kappa(b - a) \cos qa. \end{aligned} \quad (3)$$

Интервалы энергии, в пределах которых абсолютная величина правой части выражения (3) не превышает единицы, соответствуют разрешенным минизонам нашей сверхрешетки. К сожалению, для произвольного k получить аналитические выражения для коэффициентов волновой функции (2) не удастся, и дальнейшие расчеты проводились численно.

3. Обсуждение результатов

На рис. 2 приведен вид волновых функций нескольких соседних минизон. Нижний график изображает волновую функцию, принадлежащую низшей минизоне, которая образовалась из основного состояния в ямах. Естественно, электронная плотность в этой минизоне в ямах в основном и сосредоточена. Вид волновых функций в пределах ямы от k фактически не зависит, при изменении его меняется лишь фазовый сдвиг между функциями соседних ячеек.

Остальные волновые функции на рис. 2 относятся к положительным энергиям, т.е. к энергиям выше разделяющего ямы основного барьера толщиной $(b - a)$. Для большинства из них

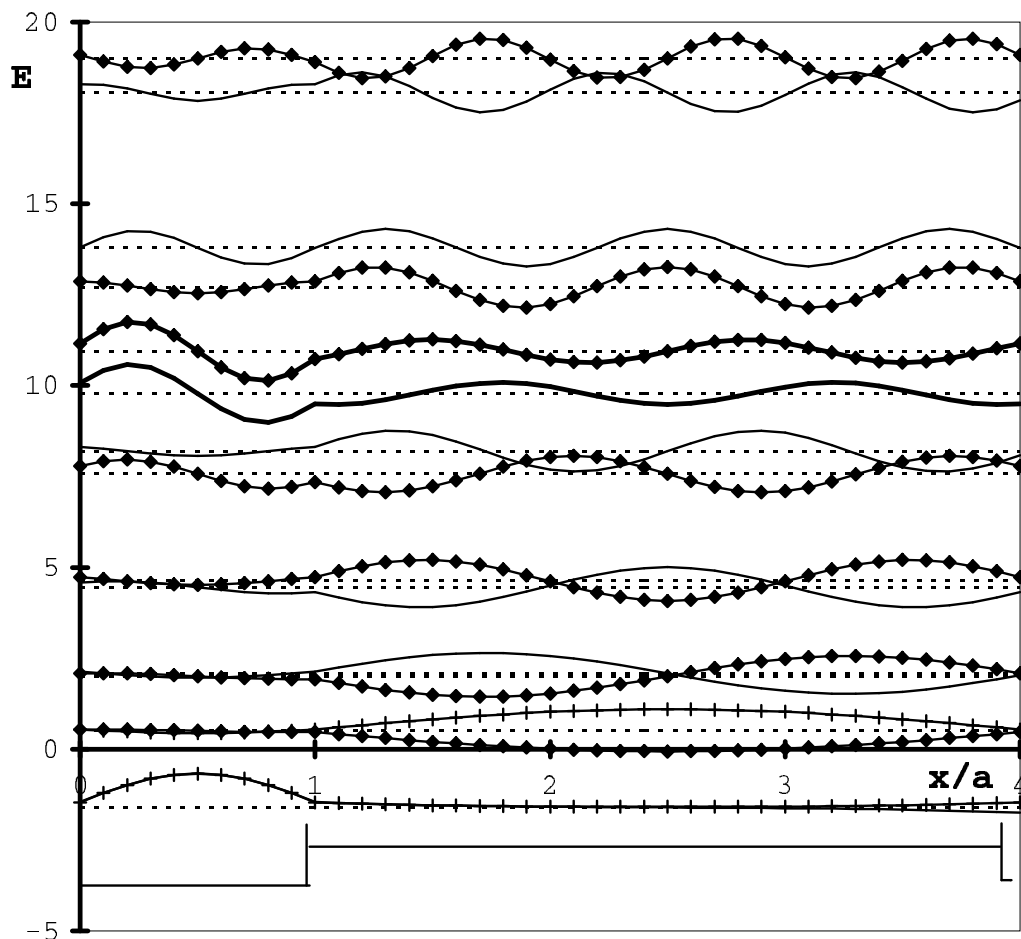


Рис. 2. Минизонная структура сверхрешетки при $b/a = 4$. Энергия отсчитывается в единицах \hbar^2/ma^2 . Границы минизон нанесены на график пунктиром. Сплошными линиям показана форма волновых функций на границах минизон, ромбиками отмечены функции, отвечающие $kb = 0$. Две жирных кривых изображают волновые функции „резонансной“ зоны. Видно, что в этой зоне электронная плотность сосредоточена преимущественно в яме, при этом оба состояния нечетны относительно середины ямы.

электронная плотность сосредоточена именно в области между ямами, т.е. эти функции построены из состояний электронов в области основных барьеров; дополнительные же δ -барьеры не пропускают частицы в область ямы. Заметим, что у таких функций, соответствующих разным краям минизоны, четность относительно центра ямы противоположна.

Исключение составляют функции, относящиеся к минизоне, расположенной вблизи энергии резонансных состояний, — будем называть ее резонансной. В ее состояниях электронная плотность велика в области ям, а их четность одинакова на обоих краях минизоны. По структуре они напоминают функции наинизшей минизоны, которая образовалась из локализованных состояний ям. Уже отсюда понятно, что дипольный матричный элемент перехода из наинизшей минизоны в минизоны, расположенные в окрестности резонанса, будет аномально велик по сравнению с другими переходами в положительную область энергий за счет значительного возрастания интеграла перекрытия волновых функций. Соответственно, в этой области увеличится и коэффициент поглощения. Частота такого перехода в реальных сверхрешетках обыкновенно лежит в ИК-области.

В качестве параметра, характеризующего поглощение в расчете на один электрон в основном состоянии, удобно использовать квадрат матричного элемента оператора импульса $p_n^2(k)$ для перехода между состояниями наинизшей и n -й возбужденной минизоны с одинаковым блоховским вектором k (из-за фактически нулевого импульса фотона переходы можно считать вертикальными). Производные величины, такие как сечение поглощения σ или коэффициент поглощения α , пропорциональны p_n^2 .

На рис. 3 и 4 изображена зависимость p_n^2 от энергии конечного состояния для двух различных значений периода сверхрешетки. Варьирование других параметров (a , Ω , V) не меняет картины качественно. Видно, во-первых, что матричный элемент перехода возрастает для целой группы минизон в окрестности резонанса. В каждой из них поглощение максимально на одном краю

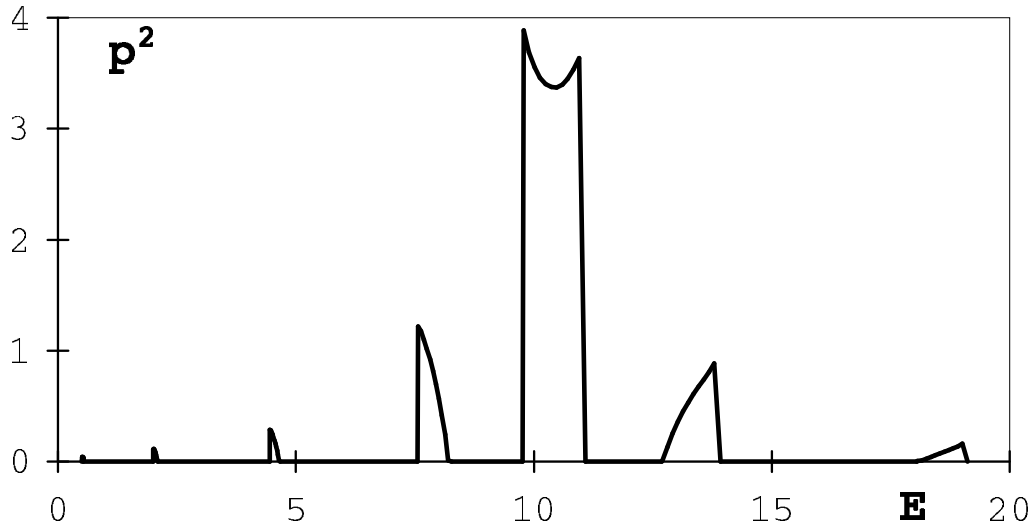


Рис. 3. Квадрат матричного элемента импульса для системы, волновые функции которой показаны на рис. 2. В минizonaх, предшествующих резонансной, поглощение монотонно падает от нижнего края к верхнему. Выше резонансной минизоны ситуация меняется на обратную. Энергия отложена в единицах $\hbar^2/(ma^2)$, а квадрат матричного элемента — в \hbar^2/a^2 .

минизоны и падает фактически до нуля на другом. Так происходит во всех минizonaх, кроме резонансной. При этом в минizonaх, предшествующих ей по энергии, поглощение монотонно падает от нижнего края к верхнему, а выше резонансной минизоны ситуация меняется на обратную. Из сопоставления с рис. 2 видно, что максимуму поглощения соответствует „правильная“ четность волновой функции внутри ямы — противоположная четности в низшей минизоне. В резонансной минизоне четность волновых функций правильная на обеих границах зоны, так что форма отвечающей ей зоны поглощения другая.

Эта картина иллюстрирует гибридный характер спектра рассматриваемой сверхрешетки. Изменение четности состояний на краях минизон при переходе через область резонанса связано с „встраиванием“ квазилокализованных состояний в яме в зонную структуру, формируемую основными барьерами.

При увеличении расстояния между ямами матричные элементы перехода падают и одновременно растет частота следования

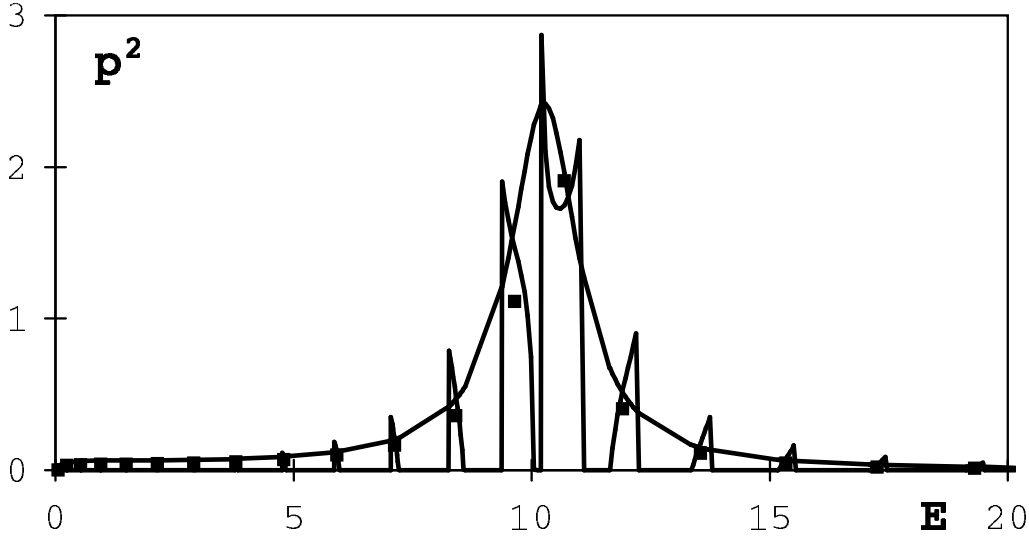


Рис. 4. Та же величина, что на рис.3, при $b/a = 10$. Квадратиками изображено отношение $\langle p_n^2 \rangle / (E_n - E_{n-1})$ для сверхрешетки, т.е. усредненная по спектральному интервалу величина матричного элемента. Гладкая кривая изображает величину произведения квадрата матричного элемента оператора импульса на плотность конечных состояний $p_{if}^2 \rho$ в уединенной квантовой яме в соответствии с [6].

минизон, так что поглощение, усредненное по интервалу, содержащему много минизон:

$$\alpha(\omega) \Delta \hbar \omega \sim \sum_{n \in \Delta \hbar \omega} \langle p_n^2 \rangle,$$

изменяется слабо. Здесь $\langle p_n^2 \rangle$ — матричный элемент перехода, усредненный по всем конечным состояниям в n -ой минизоне, а суммирование по n ведется по тем минизонам, которые попадают в соответствующий $\Delta \hbar \omega$ интервал конечных энергий. Напомним, что число состояний в минизоне не зависит от ее ширины, оно определяется только количеством ячеек в сверхрешетке.

Заметим, что в реальной сверхрешетке пики, соответствующие отдельным минизонам, могут размываться. Во-первых, когерентность сверхрешеточных состояний ухудшается за счет неизбежных флуктуаций толщин слоев, так что блоховский квазиимпульс k перестает быть хорошим квантовым числом. К некоторому размыванию пиков должен привести и учет различия

эффективных масс электронов в ямах и барьерах структуры, которым мы здесь пренебрегли для простоты расчета.

4. Сопоставление с характеристиками уединенной ямы

В работе [6] был проведен аналитический расчет электронных и оптических свойств гетероструктуры, состоящей из одиночной квантовой ямы с тем же самым модельным потенциалом (1). Естественно ожидать, что результаты настоящих вычислений будут согласовываться с выводами работы [6] в пределе редко расположенных ям, т.е. для долгопериодической сверхрешетки с $b/a \gg 1$.

Физической величиной, характеризующей оптическое поглощение в одиночной квантовой яме в расчете на один носитель, является $p_n^2 \rho$, где p_n^2 — квадрат матричного элемента оператора импульса, а ρ — плотность конечных электронных состояний. Для сверхрешетки аналогичным параметром, характеризующим усредненное по интервалу энергии поглощение в расчете на один электрон, будет в окрестности n -й минизоны $\langle p_n^2 \rangle / (E_n - E_{n-1})$. Здесь $\langle p_n^2 \rangle$ — усредненный по состояниям n -й минизоны квадрат матричного элемента, а E_n — энергия середины минизоны (при $kb = \pi/2$). Как видно из рис. 4, уже при $b/a = 10$ эти две величины совпадают между собой достаточно хорошо.

5. Заключение

Таким образом, в сверхрешетке, имеющей резонансные состояния в элементарной ячейке, средняя величина дипольного матричного элемента переходов из низшей подзоны в выше расположенные заметно увеличивается для тех конечных подзон, которые лежат в окрестности резонанса. Это возрастание тем сильнее, чем ближе по энергии к резонансу располагается подзона. Для всех конечных подзон, кроме одной, ближайшей к ре-

зонансу, матричный элемент обращается в ноль на одной из границ подзоны. Подобным образом будет вести себя и коэффициент межподзонного поглощения сверхрешетки, который может быть рассчитан по известному матричному элементу совершенно аналогично [6]. На форме же пика поглощения минизоны, располагающейся ближе всего к резонансу, сильно сказывается „встраивание“ квазилокализованных состояний в спектр.

Работа была частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (гранты 96-15-96500 и 97-02-17334).

Литература

- [1] В.П.Кайданов, Ю.И.Равич. *УФН*, **145**, 51 (1985).
- [2] Р.В.Поль, *Введение в оптику*. М.–Л.: ОГИЗ, Гос. изд-во технико-теоретич. литер-ры, 1947. §122.
- [3] В.Гайтлер, *Квантовая теория излучения*. М.: Изд-во иностранной литер-ры, 1956.
- [4] С.Д.Бенеславский, А.В.Дмитриев, Н.С.Салимов. *ЖЭТФ*, **92**, 305 (1987).
- [5] A.V.Dmitriev. *Solid State Commun.*, **74**, 237 (1990).
- [6] A.V.Dmitriev, R.Keiper, V.V.Makeev. *Semiconductor Sci. and Technol.*, **11**, 1791 (1996).
- [7] B.F.Levine. *J. Appl. Phys.*, **74**, R1 (1993).
- [8] G.Bastard. *Phys. Rev. B*, **24**, 5693 (1981).
- [9] G.Bastard. *Phys. Rev. B*, **25**, 7584 (1982).
- [10] Hung-Sik Cho, P.R. Prucnal. *Phys. Rev. B*, **36**, 3237 (1987).