

ЭПР МЕЛКИХ ДОНОРОВ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ: ВОДОРОДОПОДОБНАЯ МОДЕЛЬ

Двуреченский А. В., Каранович А. А., Колесникова О. Л.

Представлен расчет вида спектра ЭПР водородоподобной примеси в квантовой яме. Получены зависимости константы сверхтонкого взаимодействия (СТВ) электронов с ядрами примеси от положения примеси в квантовой яме, от ширины ямы и от угла между нормалью к стенке ямы и направлением магнитного поля. Рассчитан вид спектра ЭПР мелких доноров, хаотично распределенных в квантовой яме для некоторых значений ширины ямы. На основании проведенных расчетов предложены параметры и тип структуры, в которой реализуются условия, необходимые для экспериментального наблюдения модификаций спектра ЭПР мелких доноров в квантовой яме.

Дополнительный сверхрешеточный потенциал способен видоизменять волновую функцию примесных состояний в полупроводниках, в частности, ее симметрию, характер гибридизации. Эти характеристики достаточно хорошо выявляются методом ЭПР, который пока не имеет примеров успешного применения для исследования сверхрешеток. Одна из проблем в исследовании методом ЭПР сверхрешеток связана с большим числом возможных неэквивалентных положений примеси в квантовой яме в отличие от ситуации в объемном материале, где примеси часто имеют лишь несколько неэквивалентных положений.

Цель настоящей работы — расчет вида спектра ЭПР мелких доноров в кремнии с квантовыми ямами и исследование зависимости константы сверхтонкого взаимодействия (СТВ) электронов с ядрами примеси от положения примеси в потенциальной яме и от ширины ямы.

За основу были взяты вариационные расчеты Бастарда для исследования локальных состояний водородоподобной примеси в квантовой яме [1]. В рамках простой модели, предполагающей, что квантовые ямы изолированы, туннельный эффект отсутствует, примесь водородоподобна, поведение носителей в прямоугольной квантовой яме описывается однозонным гамильтонианом со сферически-симметричной эффективной массой, решалась задача со следующим гамильтонианом [1]:

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\hbar^2 p^2}{2m^*} \frac{e^2}{k \sqrt{(z - z_i)^2 + \rho^2}} + V(z), \quad (1)$$

где $V(z)$ — потенциальный профиль ямы, ограничивающий движение носителей, z_i — координата положения примеси по нормали к стенке ямы (начало координат помещено в центре ямы), $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ — расстояние до примесного атома в плоскости, параллельной стенкам ямы, k — диэлектрическая проницаемость.

Для решения применялась вариационная процедура с пробной волновой функцией, задаваемой при $|z| < L/2$ формулой [1]

$$\varphi = N \cos(k_1 z) \exp \left\{ -\frac{1}{\lambda} (\rho^2 + (z - z_i)^2)^{1/2} \right\} \quad (2)$$

и равной нулю вне ямы. Здесь λ — вариационный параметр, N — нормировочный множитель, L — ширина ямы, $k_1 = \pi/L$.

Исходя из данного вида волновой функции аналитически вычисляется полная энергия системы E , численная минимизация которой по вариационному параметру позволяет определять значения λ , отвечающие равновесному положению системы. Данная процедура минимизации была проделана в настоящей работе методом градиентного спуска. Полученные в результате значения λ подставлялись в формулу (2) для определения волновой функции φ , которая использовалась для расчета константы СТВ по известной формуле [2]

$$A = \frac{\hbar}{g\beta} [(A - B) + 3B(2A + B) \cos^2 \theta]^{1/2}, \quad (3)$$

где

$$A = \frac{1}{\hbar} g\beta g_N \beta_N |\varphi(0)| \quad (4)$$

— изотропная часть константы СТВ,

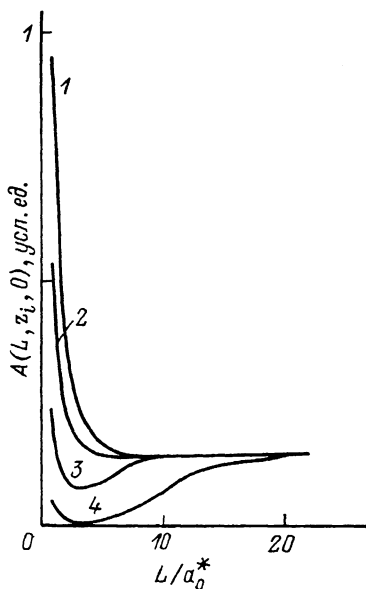


Рис. 1. Расчетные зависимости величины константы СТВ от ширины квантовой ямы L для нескольких положений атома примеси z_i при $\theta=0$.

1 — $z_i=0$; 2 — $z_i=0.2L$; 3 — $z_i=0.3L$; 4 — $z_i=0.4L$.

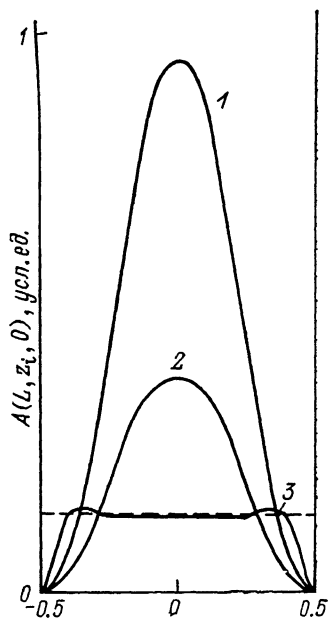


Рис. 2. Расчетные зависимости величины константы СТВ от положения примеси z_i для некоторых значений ширины ямы L при $\theta=0$.

1 — $L = a_0^*$; 2 — $L = 2a_0^*$; 3 — $L = 20a_0^*$.

$$B = \frac{1}{\hbar} g\beta g_N \beta_N \left\langle \frac{3 \cos^2 \alpha - 1}{2r^3} \right\rangle \quad (5)$$

— анизотропная часть константы СТВ.

В этих выражениях $|\varphi(0)|$ — значение волновой функции в центре ядра, g — электронный g -фактор, β — магнетон Бора, g_N — ядерный g -фактор, β_N — ядерный магнетон, α — угол между радиус-вектором r и нормалью к стенке ямы, θ — угол между направлением магнитного поля и нормалью к стенке ямы. Угловые скобки означают усреднение по электронной волновой функции.

В результате проведенных расчетов (в дальнейшем для определенности будем говорить о фосфоре, спин-ядра $1/2$) установлено, что величина константы СТВ при некоторых z_i и L существенным образом зависит не только от ширины ямы L и положения примеси z_i , но и от угла между направлением магнитного поля и нормалью к стенке ямы.

Зависимость постоянной СТВ A от ширины ямы при разных значениях z_i и при $\theta=0$ показана на рис. 1. Если атом примеси локализован в центре ямы

($z_i/L=0$) или несколько смещен ($z_i/L \leq 0.2$), величина СТВ является убывающей функцией ширины ямы. В случае, когда примесный атом расположен вблизи стенки квантовой ямы ($z_i/L \sim 0.3-0.4$), на графиках зависимости появляется минимум при $L=4a_0^*$ ($a_0^*=1.27 \cdot 10^{-7}$ см — боровский радиус примеси Р). Однако с ростом L ($L > 20a_0^*$) величина СТВ перестает зависеть от z_i и стремится к своему значению в объемном материале. Появление минимума для $z_i/L \sim 0.3-0.4$ качественно можно объяснить следующим образом. При уменьшении ширины ямы L ближайшая стенка начинает смещать электронное облако, уменьшая плотность волновой функции на ядре, а следовательно, и константу СТВ. При дальнейшем уменьшении L начинает проявляться влияние второй стенки, что приводит к увеличению плотности волновой функции на ядре и постоянной СТВ.

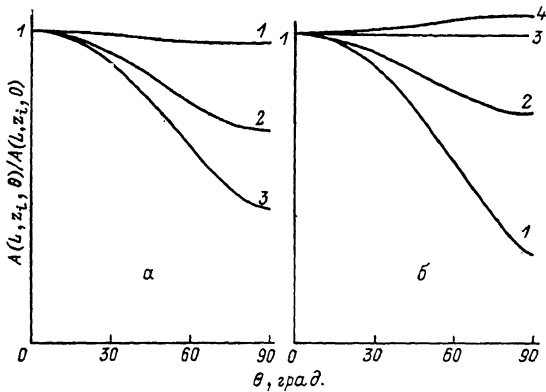


Рис. 3. Угловые зависимости константы СТВ.

а — для некоторых L при фиксированном $z_i=0.475a_0^*$: 1 — $25a_0^*$; 2 — $7a_0^*$; 3 — a_0^* ; б — для некоторых z_i при фиксированном $L=a_0^*$: 1 — $0.475L$; 2 — $0.375L$; 3 — $0.225L$; 4 — $0.025L$.

На рис. 2 показана зависимость постоянной СТВ от примесного положения z_i при $\theta=0$ для нескольких значений L . При малых L (a_0^* , $2a_0^*$) величина СТВ возрастает с уменьшением $|z_i/L|$ (т. е. при удалении атома примеси от стенки ямы) и достигает максимума при $z_i/L=0$. С увеличением ширины ямы величина постоянной СТВ стремится к своему значению в объемном материале. Характер зависимости, очевидно, объясняется, как и в описанном выше случае, искажением электронного облака при приближении атома к одной из стенок ямы, что приводит к уменьшению плотности волновой функции на ядре.

Анализ угловых зависимостей константы СТВ показал, что для положения примеси $z_i > 0.225L$ A максимально при $\theta=0^\circ$ и минимально при $\theta=90^\circ$, при меньших z_i анизотропия сверхтонкого взаимодействия имеет противоположный знак. Кроме того, установлено, что анизотропия СТВ тем больше, чем меньше размер ямы и чем ближе к стенке ямы расположен примесный атом (рис. 3).

Изложенные результаты относятся к случаю фиксированного при определенном z_i положения примеси в яме. В реальных структурах, очевидно, реализовать такую ситуацию будет трудно. Исходя из этого мы провели вычисления формы спектра ЭПР в случае хаотичного по z_i распределения примеси. Полученные результаты схематично представлены на рис. 4. Видно, что хаотичность распределения примеси проявляется при достаточно больших L ($L > 10a_0^*$) в уширении резонансных линий и в появлении третьей центральной линии при малых L ($L < 5a_0^*$). Анизотропия сверхтонкого расщепления мала и в спектре практически не проявляется.

Проведенные расчеты позволяют проанализировать условия, необходимые для экспериментального наблюдения модификаций спектра ЭПР мелких доноров в квантовых ямах. Прежде всего очевидно, что ширина ямы должна быть меньше $10a_0^*$ ($\sim 130 \text{ \AA}$), когда, с одной стороны, достаточно сильно проявляется изменение величины СТВ, а, с другой стороны, размытие линий сравнительно

невелико Концентрация доноров в яме не должна превышать $\sim 10^{17} \text{ см}^{-3}$, в противном случае обменные эффекты приведут к модификации спектра доноров [3, 4]. Задавшись чувствительностью метода ЭПР ($\sim 10^{12}$ спин/Гс) и шириной резонансных линий (1—2 Гс), легко оценить количество слоев с толщиной $\leq 130 \text{ \AA}$, необходимых для наблюдения спектра доноров: $n \geq 10$.

Одной из возможных структур, в которых может реализоваться описанная физическая ситуация, являются, очевидно, получаемые путем модулированного легирования кремния сверхрешетки типа $n^+ - n - n^+ - p^+$. Мелкие доноры в нейтральном зарядовом состоянии [наиболее удобен в данном случае фосфор,

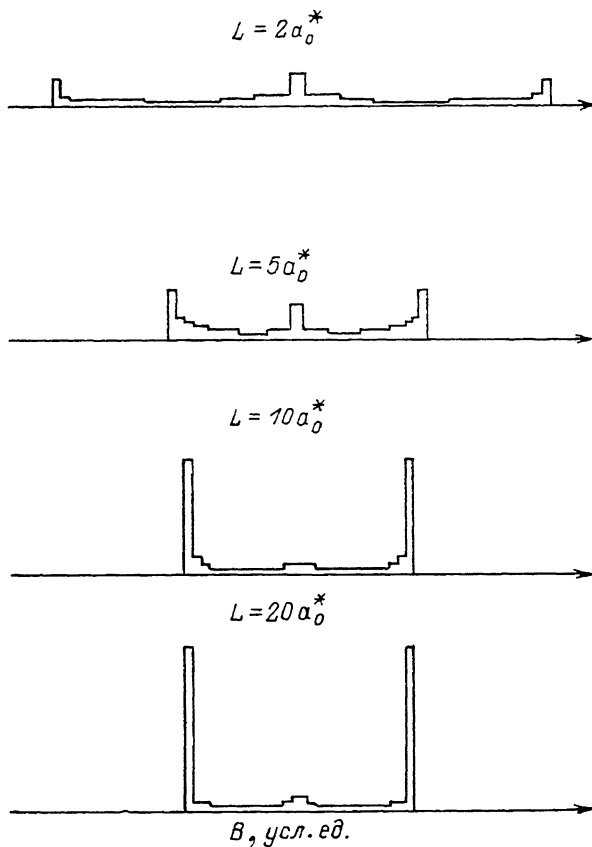


Рис. 4. Схематическое изображение формы спектра ЭПР мелких доноров, хаотически распределенных в квантовой яме при некоторых значениях ширины ямы L и $\theta = 0$.

имеющий минимальное число линий (две) в спектре ЭПР] в n -слоях будут находиться на дне квантовых ям, ограниченных потенциальными барьерами, создаваемыми $n^+ - p^+$ -слоями. При этом квантовые ямы будут иметь непрямой характер, что приведет к изменению численных параметров, полученных нами из расчета простейшей модели, однако качественный характер приведенных в работе зависимостей, очевидно, сохранится. Эту трудность можно обойти, используя для наблюдения модификаций спектра ЭПР мелкой донорной примеси в квантовой яме структуру на основе гетеропереходов, например GaP—Si. Потенциал в этом случае будет иметь прямоугольную форму, что соответствует выбранной нами модели.

В заключение отметим, что проведенные расчеты представляют интерес и с точки зрения возможности определения по виду наблюдаемого спектра ЭПР некоторых характеристик квантовых ям, таких как ее ширина, положение примеси и т. д.

Авторы выражают благодарность Г. Н. Феофанову за полезное обсуждение и ценные замечания.

Список литературы

- [1] Bastard G. // Phys. Rev. B. 1981. V. 24. P. 4714—4722.
- [2] Вертц Дж., Болтон Дж. Теория и практические применения метода ЭПР. М., 1975. 548 с.
- [3] Рембеза С. И. Парамагнитный резонанс в полупроводниках. М., 1988. 176 с.
- [4] Херман М. Полупроводниковые сверхрешетки. М., 1989. 240 с.

Институт физики полупроводников СО АН СССР
Новосибирск

Получена 8.01.1991
Принята к печати 28.01.1991

