1991 PHYSICS AND TECHNICS OF SEMICONDUCTORS vol. 25, N 10

ЭКСИТОНЫ И ПРИМЕСНЫЕ ЦЕНТРЫ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СВЕРХРЕШЕТКЕ В МЕТОДЕ ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЫ

Ивченко Е. Л., Кавокин А. В.

Рассчитаны периодическая зависимость энергии связи электрона на доноре от положения примесного центра в короткопериодичной сверхрешетке и зависимость продольно-поперечного расщепления экситона ω_{LT} от периода сверхрешетки d. Расчет проводился в методе эффективной массы с учетом непараболичности электронного минизонного спектра. Результаты сравниваются с экспериментальными данными по ω_{LT}, полученными из спектров интерференционного отражения света от структур со сверхрешеткой.

Введение. Задача о мелком примесном центре в структуре с квантовыми ямами или сверхрешетке (СР) не имеет аналитического решения даже для простой зонной структуры исходных композиционных материалов. Она решалась численно вариационным методом для толстобарьерной сверхрешетки [1, 2] и сверхрешетки с барьерами произвольной толщины [3]. В данной работе для нахождения энергии связи ε электрона на доноре в короткопериодичной сверхрешетке используется метод эффективной массы. В этом методе уравнение Шредингера с гамильтонианом, включающим в себя сверхструктурный периодический потенциал, сводится к эквивалентному уравнению для электрона с минизонным энергетическим спектром E (**k**), рассчитываемым в модели Кронига—Пенни. Мы покажем, что учет поправок к методу эффективной массы позволяет, избегая сложных численных расчетов, найти (периодическую) зависимость энергии ε от положения донора в гетероструктуре. Ранее [4] метод эффективной массы привлекался для расчета волновой функции и силы осциллятора $1s$-экситона в сверхрешетке.[1] При этом в разложении минизонной энергии E (**k**) по степеням **k** удерживались лишь параболические члены. Здесь мы проанализируем влияние непараболических слагаемых в E (**k**) на энергию связи электрона на доноре и состояние экситона в сверхрешетке.

1. Мелкий примесный центр

Рассмотрим композиционную СР, составленную из слоев типа A (квантовая яма) и B (барьер) с эффективными массами m_A и m_B в соответствующих объемных материалах. Введем суперблоховские огибающие волновой функции электрона в такой СР:

$$\chi_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} U_{\nu\mathbf{k}}(z), \tag{1}$$

где ν — индекс минизоны, **k** — минизонный волновой вектор, $U_{\nu\mathbf{k}}(z)$ — суперблоховская амплитуда, периодическая с периодом СР $d=a+b$ (a и b — толщины слоев типа A и B) и нормированная условием

$$\int_S |U_{\nu\mathbf{k}}(z)|^2 dz = d. \tag{2}$$

[1] Сила осциллятора экситона в СР $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ рассчитывалась также в недавно опубликованной работе [5].

Разложим по функциям $\chi_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ волновую функцию электрона, локализованного на доноре в СР:

$$\varphi(r)=\sum_{\nu\mathbf{k}} G_{\nu\mathbf{k}}\chi_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \tag{3}$$

Энергию электрона в состоянии (3) можно представить в виде

$$E=T+V_{\text{кул}},\quad T=\sum_{\nu\mathbf{k}} E_\nu(\mathbf{k})\,|G_{\nu\mathbf{k}}|^2,\quad V_{\text{кул}}=-\frac{e^2}{\varkappa}\int d\mathbf{r}\varphi^2(\mathbf{r})\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|}. \tag{4}$$

Здесь $E_\nu(\mathbf{k})$ — энергия свободного электрона в регулярной СР, $\mathbf{r}_i$ — положение донорного центра, $\varkappa$ — диэлектрическая проницаемость. Переходя в выражении для «кинетической энергии» T от суммирования по $\mathbf{k}$ к интегрированию по $\mathbf{r}$, получим

$$T=\sum_\nu\int d\mathbf{r}G_\nu(\mathbf{r})\,E_\nu(-i\nabla)\,G_\nu(\mathbf{r}), \tag{5}$$

где функция

$$G_\nu(\mathbf{r})=\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}G_{\nu\mathbf{k}}$$

описывает движение электрона относительно примесного центра. В СР с периодом, малым по сравнению с боровским радиусом, можно пренебречь смешиванием состояний из разных минизон. Поэтому для основного состояния нейтрального донора в (3)—(5) нужно положить $\nu=1$; в дальнейшем индекс 1 у функций χ_ν, U_ν, $E_\nu(\mathbf{k})$ и G_ν будет опускаться.

Пренебрегая при расчете кулоновской энергии зависимостью $U_{\mathbf{k}}(z)$ от $\mathbf{k}$, получаем после некоторых преобразований

$$\begin{gathered} V_{\text{кул}}=V^0_{\text{кул}}+\Delta V_{\text{кул}},\\ V^0_{\text{кул}}=-\frac{e^2}{\varkappa}\int G^2(\mathbf{r})\frac{d\mathbf{r}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|},\\ \Delta V_{\text{кул}}=-\frac{e_2}{\varkappa}\int G^2(\mathbf{r}+\mathbf{r}_i)\,[U_0(z+z_i)-1]\frac{d\mathbf{r}}{r}. \end{gathered} \tag{6}$$

В короткопериодичной СР вклад $\Delta V_{\text{кул}}$ мал и состояние локализованного электрона удовлетворяет уравнению Шредингера

$$\left[E(-i\nabla)-\frac{e^2}{\varkappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|}\right]G(\mathbf{r})=(E^0-\varepsilon)\,G(\mathbf{r}), \tag{7}$$

где E^0 — энергия электрона на дне нижней минизоны, ε — энергия связи. В параболическом приближении

$$E(\mathbf{k})=E^0+\frac{\hbar^2\mathbf{k}_z^2}{2m_\parallel}+\frac{\hbar^2\mathbf{k}_\perp^2}{2m_\perp}, \tag{8}$$

где z — главная ось СР, $m_\parallel$ и $m_\perp$ — эффективные массы электрона в минизоне $\nu=1$, которые можно рассчитать в модели Кронига—Пенни (см. [4]). При вариационном методе решения уравнения (7) хорошие результаты для $1s$-состояния дает простейший выбор пробной функции [6, § 27]:

$$G(\rho,\ z)=\frac{1}{\sqrt{\pi a_\parallel a_\perp^2}}\exp\left[-\left(\frac{\rho^2}{a_\perp^2}+\frac{(z-z_i)^2}{a_\parallel^2}\right)^{1/2}\right], \tag{9}$$

где $\boldsymbol{\rho}=(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)_\perp$, $a_\perp$ и $a_\parallel$ — вариационные параметры. В этом случае

$$\begin{gathered} T=E^0+\frac{1}{3}\left(2+\frac{\gamma}{1-\alpha^2}\right)\left(\frac{a_B^\perp}{a_\perp}\right)^2E_B^\perp,\\ V^0_{\text{кул}}=-2E_B^\perp\frac{a_B^\perp}{a_\perp}\frac{\arcsin\alpha}{\alpha}, \end{gathered} \tag{10}$$

где

$$\alpha^2=(a_\perp^2-a_\parallel^2)/a_\perp^2,\quad \gamma=m_\perp/m_\parallel,\quad E_B^\perp=m_\perp e^4/2\hbar^2\varkappa^2,$$
$$a_B^\perp=\hbar^2\varkappa/m_\perp e^2.$$

Минимизация функционала $T+V^0_{\text{кул}}$ приводит к следующим уравнениям для $a_\perp$ и α:

$$a_\perp = a_B^{\perp} \frac{2}{3} \frac{\alpha^3}{\arcsin \alpha - \alpha\sqrt{1-\alpha^2}}, \qquad \gamma = 2(1-\alpha^2)^{3/2} \frac{\sqrt{1-\alpha^2}\arcsin\alpha - \alpha}{\alpha\sqrt{1-\alpha^2} - \arcsin\alpha}. \tag{11}$$

Отметим, что в случае слабой анизотропии эффективной массы соотношения (10), (11) в первом приближении по малому параметру $(1-\gamma)$ принимают вид

$$\alpha^2 = \frac{5}{7}(1-\gamma), \quad a_\perp = a_B^{\perp}\left[1-\frac{3}{14}(1-\gamma)\right], \qquad \varepsilon = \frac{e^4}{2\hbar^2\varkappa^2}\left(\frac{2}{3}m_\perp + \frac{1}{3}m_\parallel\right). \tag{12}$$

В СР с малым периодом

$$d \ll \left(m_{A,B} V/\hbar^2\right)^{-1/2},$$

где V — потенциальный барьер на интерфейсе, массы $m_\parallel$, $m_\perp$ связаны с эффективными массами m_A, m_B в однородных материалах ямы и барьера простыми соотношениями

$$m_\parallel = \frac{m_A a + m_B b}{a+b}, \quad \frac{1}{m_\perp} = \frac{1}{a+b}\left(\frac{a}{m_A} + \frac{b}{m_B}\right).$$

Учитывая эмпирическую связь между массой m_B и составом x твердого раствора $Al_xGa_{1-x}As$, можно убедиться в том, что в СР $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ при $x \leqslant 0.4$ анизотропия эффективной массы не превышает 4 %. Поэтому значения m в (12) можно заменить на $m_\perp$ или $m_\parallel$ и в пределе $d \to 0$ (в условиях $a/b=\text{const}$):

$$\varepsilon \approx \frac{e^4}{2\varkappa^2\hbar^2} \frac{m_A m_B (a+b)}{a m_A + b m_B} \approx \frac{e^4}{2\varkappa^2\hbar^2} \frac{a m_A + b m_B}{a+b}.$$

Ранее этот предельный случай был проанализирован в [2].

Энергии T и $V^0_{\text{кул}}$ не зависят от положения донора в СР. Такая зависимость возникает при учете поправки $\Delta\varepsilon = -\Delta V_{\text{кул}}$ к энергии связи, которую можно рассматривать как аналог химического сдвига энергии основного состояния мелкого примесного центра в однородном полупроводнике. Разложим периодическую функцию $U_0(z)$ в ряд Фурье

$$U_0(z) = \sum_\beta C_\beta e^{i\beta z},$$

где $\beta = 2\pi l/d$, $(l=0, \pm 1, \ldots)$. Используя интегральное соотношение

$$\int e^{i\mathbf{qr}} \frac{d\mathbf{r}}{r} = \frac{4\pi}{q^2},$$

для короткопериодичной СР с $d < a_B$ получаем

$$\Delta\varepsilon = 4K \sum_{\beta\neq\beta'} \frac{C^*_\beta C_{\beta'}}{(\beta-\beta')^2} e^{i(\beta'-\beta)z_i} = 4K \lim_{\eta\to+0} \frac{d}{d\eta} \int_0^\infty \left[U_0^2(z+z_i) - 1\right] e^{-\eta z} dz =$$
$$= K\left[\frac{d^2}{3} + 2\int_0^d U_0^2(z+z_i)\left(\frac{z^2}{d} - z\right) dz\right] = K\left(-\frac{d^2}{6} + R_1^2 - R_2^2 + 2z_i^2\right), \tag{13}$$

где $K = e^2/(\varkappa a_\parallel a_\perp^2)$,

$$R_1^2 = \frac{4}{d}\int_0^{d/2} U_0^2\left(z+\frac{d}{2}\right) z^2 dz, \quad R_2^2 = 4\int_0^{z_i} U_0^2(z)(z_i - z)\, dz. \tag{14}$$

Заметим, что при нормировке (2) $R_2^2(Nd)=2(Nd)^2$, где N — целое число, поэтому функция $R_2^2(z_i)-2z_i^2$, а значит, и функция $\Delta\varepsilon(z_i)$ периодичны с периодом d.

Для нижней минизоны

$$U_0(z)=\begin{cases} C_a\cos k(z-\bar z_a) & \text{в ямах,}\\ C_b\,\mathrm{ch}\,\varkappa(z-\bar z_b) & \text{в барьерах.}\end{cases} \tag{15}$$

Здесь $\bar z_{a,b}$ — положение центра соответствующей ямы или барьера,

$$k=(2m_AE^0/\hbar^2)^{1/2},\quad \varkappa=[2m_B(V-E^0)/\hbar^2]^{1/2},$$

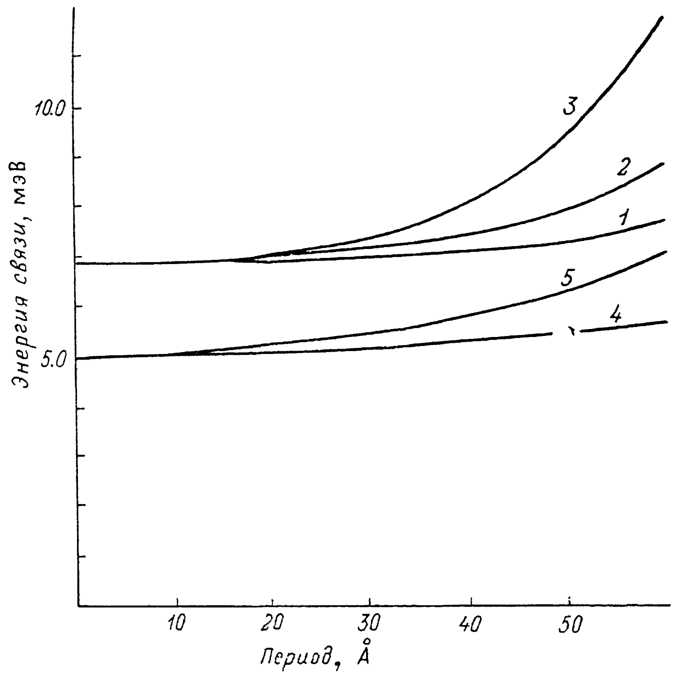

Рис. 1. Зависимость от периода d энергии связи электрона на доноре в центре ямы (*1—3*) и электронно-дырочной пары в экситоне (*4*, *5*) в СР $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ с равной толщиной слоев $a=b$.

1, *4* рассчитаны в параболическом приближении, *3* — расчет с учетом «химического сдвига» $V_{\text{кул}}$, *2*, *5* — расчет с учетом непараболичности минизонного спектра $E(k)$.

выражения для коэффициентов C_a и C_b приведены в [4]. Подставляя (15) в (14), получаем при $|z_i|<a/2$

$$R_1^2=\frac{1}{4d}\left\{C_a^2\left[\frac{d^3-b^3}{3}-\frac{2b}{k^2}\cos ka+\frac{2d}{k^2}+\frac{1}{k^3}(k^2b^2-2)\sin ka\right]+\right.$$
$$\left.+C_b^2\left[\frac{b^3}{3}-\frac{2b}{\varkappa^2}\mathrm{ch}\,\varkappa b+\frac{1}{\varkappa^3}(\varkappa^2b^2+2)\,\mathrm{sh}\,\varkappa b\right]\right\}, \tag{16}$$

$$R_2^2=C_a^2\left(z_i^2+\frac{\sin^2 kz_i}{k^2}\right), \tag{17а}$$

при $a/2\leqslant|z_i|\leqslant d/2$

$$R_2^2=C_a^2\left[a\left(z_i-\frac{a}{4}\right)+\frac{1}{2k^2}(1-\cos ka-ka\sin ka)+\frac{z_i}{k}\sin ka\right]+$$
$$+C_b^2\left\{\left(z_i-\frac{a}{2}\right)^2+\frac{1}{2\varkappa^2}\left[\mathrm{ch}\,2\varkappa\left(z_i-\frac{d}{2}\right)-\mathrm{ch}\,\varkappa b\right]+\frac{1}{\varkappa}\left(z_i-\frac{a}{2}\right)\mathrm{sh}\,\varkappa b\right\}. \tag{17б}$$

На рис. 1 (кривые *1—3*) представлена зависимость энергии связи электрона на доноре от периода СР, рассчитанная с использованием (10), (13) для СР $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ с $a=b$, $m_A=0.067\ m_0$, $m_B/m_A=1.44$, $V=0.262$ эВ, $\varkappa=12.5$.

Кривые *1* и *2* рассчитаны соответственно без учета и с учетом поправки $V_{\text{кул}}$. При расчете кривой *3* в разложении (8) учтено непараболическое слагаемое

$$\Delta E(\mathbf{k}) = \Lambda k_z^4. \tag{18}$$

Используя дисперсионное уравнение для энергии $E(\mathbf{k})$ в модели Кронига—Пенни, можно показать, что

$$\Lambda = -\frac{\hbar^2}{8m_\parallel}\left(\frac{d^3}{3} + \frac{\hbar^2}{m_\parallel}D\right),$$
$$D = \frac{f''}{f'} + 2\left[\frac{g'}{g} + \frac{(\sin ka)'}{\sin ka} + \frac{(\operatorname{sh}\varkappa b)'}{\operatorname{sh}\varkappa b} - \frac{k'}{k} - \frac{\varkappa'}{\varkappa}\right], \tag{19}$$
$$f = k(\operatorname{tg}\Phi_a - \eta\operatorname{th}\Phi_b), \quad g = \varkappa(\eta^{-1}\operatorname{ctg}\Phi_a + \operatorname{cth}\Phi_b),$$

где

$$\Phi_a = \frac{ka}{2}, \quad \Phi_b = \frac{\varkappa b}{2}, \quad \eta = \frac{m_A\varkappa}{m_B k},$$

штрих означает дифференцирование по E^0. Оценки показывают, что коэффициенты при непараболических членах $k_z^2k_\perp^2$ и $k_\perp^4$ достаточно малы, и соответствую-

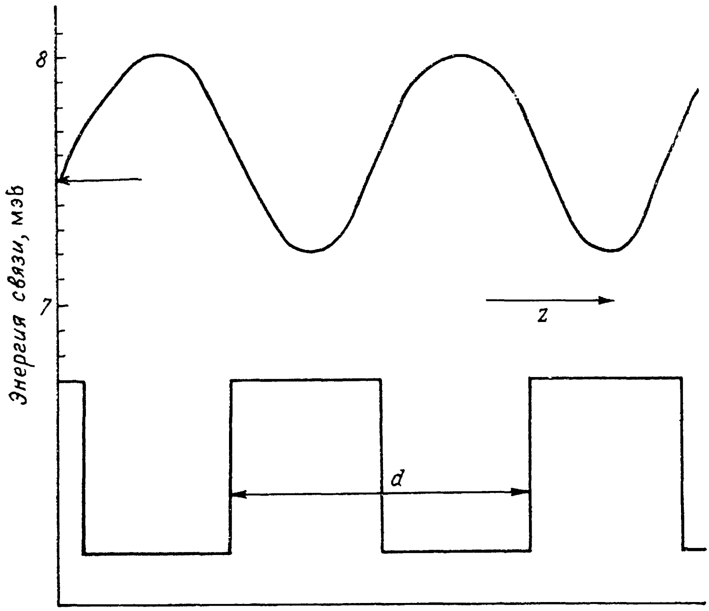

Рис. 2. Зависимость энергии связи электрона от положения примесного центра в СР GaAs/$Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ с периодом $d=50$ Å ($a=b$).

Стрелкой указана энергия связи в пренебрежении поправкой $\Delta V_{\text{кул}}$. Для удобства, кроме кривой $\varepsilon(z_i)$, изображен также сверхструктурный потенциал $V(z)$.

щими поправками к ε можно пренебречь. Из сравнения кривой *3* с кривыми *1*, *2* видно, что вклад непараболичности (18) в энергию связи превышает химический сдвиг (13). Так как коэффициент Λ в (18) отрицателен, эффективная масса с увеличением энергии возрастает, чем и объясняется возрастание энергии связи при учете непараболичности. В следующем разделе мы учтем $\Delta E(\mathbf{k})$ при расчете состояния и силы осциллятора экситона в СР.

Зависимость энергии связи ε от положения примесного центра в СР с периодом $d=50$ Å изображена на рис. 2. Естественно, что значение ε, рассчитанное при $\Lambda=0$, лежит внутри области изменения $\varepsilon(z_i)$. Разность энергий связи $\varepsilon(0)-\varepsilon(a/2)$ для донора, расположенного соответственно в центре ямы и на интерфейсе, согласуется по порядку величины с результатом численного расчета [3].

2. Продольно-поперечное расщепление экситона

Как и в [4], будем пренебрегать туннелированием тяжелой дырки в барьер, считая, что продольные минизонные массы электрона и дырки удовлетворяют неравенству $m_{\parallel} \ll m^h_{\parallel}$. В этом случае волновая функция $f(\mathbf{r})$ относительного движения электрона и дырки в экситоне удовлетворяет уравнению

$$\left[\frac{\hbar^2 \hat{k}_z^2}{2m_{\parallel}} + \frac{\hbar^2 \hat{\mathbf{k}}_{\perp}^2}{2\mu_{\perp}} + \Delta E(\hat{\mathbf{k}}) - \frac{e^2}{\varkappa r}\right] f(\mathbf{r}) = -\varepsilon_{exc} f(\mathbf{r}), \qquad (20)$$

где $\hat{\mathbf{k}} = -i\nabla$, $\mu_{\perp} = m_{\perp} m^h_{\perp}/(m_{\perp} + m^h_{\perp})$, $m^h_{\perp}$ — эффективная масса для движения дырки в плоскости слоя (x, y), поправка $\Delta E(\mathbf{k})$ определена в (18), ε_{exc} — энер-

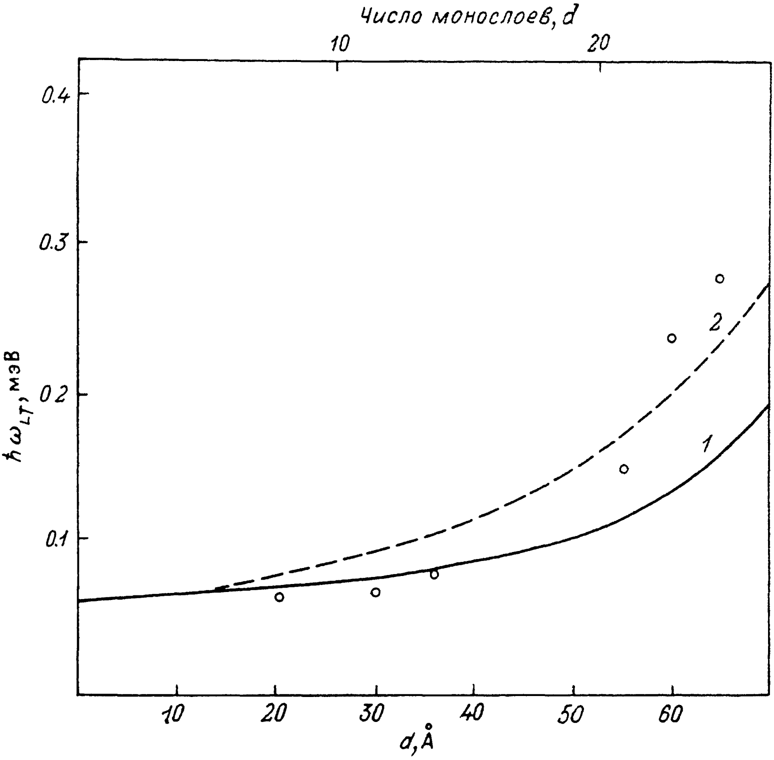

Рис. 3. Зависимость продольно-поперечного расщепления экситона от периода СР GaAs/$Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ с $a=b$.

Точки — эксперимент [4], кривые — расчет в параболическом приближении (*1*) и с учетом непараболичности электронного минизонного спектра (*2*).

гия связи экситона. В качестве пробной функции возьмем также экспоненту (9) с двумя вариационными параметрами $a_{\parallel}$ и $a_{\perp}$, положив в (9) $z_i = 0$. Для вклада непараболичности в энергию связи в первом порядке получаем

$$\Delta\varepsilon_{exc} = \Lambda a_{\parallel}^{-4}.$$

Из двух уравнений (11) для $a_{\perp}$ и a в задаче об экситоне первое сохраняет свой вид, а к правой части второго добавляется слагаемое $6\Lambda/(a_{\parallel} a_B^{\perp})^2$, где $a_B^{\perp} = \hbar^2\varkappa/\mu_{\perp} e^2$. Продольно-поперечное расщепление $\hbar\omega_{LT}^{(SL)}$ экситона в СР рассчитывалось по формуле (18) в [4]. На рис. 1 (кривые *4*, *5*) изображена зависимость $\varepsilon_{exc}(d)$ соответственно при $\Lambda = 0$ и значениях Λ, найденных из (19). На рис. 3 представлена зависимость $\hbar\omega_{LT}^{(SL)}(d)$. Видно, что учет непараболичности дает значительную поправку, относительная величина которой возрастает с увеличением периода СР.

В заключение отметим, что развитый здесь подход можно использовать для СР с периодом, значения которого ограничены сверху боровским радиусом связанного электрона или экситона и снизу пределом применимости модели Кронига—Пенни.

Авторы благодарны Г. Е. Пикусу за полезное обсуждение работы.

Список литературы

[1] Jia-Lin Zhu // Phes. Rev. 1989. V. B40. N 15. P. 10529—10534.
[2] Liu Z., Ma D. // J. Phys. C: Sol. St. Phys. 1986. V. 19. N 15. P. 2757—2766.
[3] Lane P., Greene R. L. // Phys. Rev. 1986. V. 33. N 8. P. 5871—5874.
[4] Ivchenko E. L., Kochereshko V. P., Kop'ev P. S., Kosobukin V. A. Ural'tsev I. N., Yakovlev D. R. // Sol. St. Commun. 1989. V. 70. N 5. P. 529—534.
[5] Dignam M. M., Sipe J. E. // Phys. Rev. 1990. V. B41. N 5. P. 2865—2878.
[6] Бир Г. Л., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М., 1972. 584 с.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Санкт-Петербург

Получена 4.03.1991
Принята к печати 19.06.1991