УДК 621.315.592

ПОЗИТРОНИЙ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУРАХ С КВАНТОВЫМИ ЯМАМИ

Е. П. Прокопьев

Научно-исследовательский институт материаловедения, 103460, Москва, Россия
(Получена 25.10.1991. Принята к печати 20.03.1992)

На волновой функции Ал. Эфроса (ФТП. 1986. Т. 20. В. 7. С. 1281) экситонного состояния позитрония Ps рассчитаны его аннигиляционные характеристики в полупроводниковых структурах с квантовыми ямами, имеющие ярко выраженные аномалии. Показано, что в случае «кремниевой» квантовой ямы вклад собственной аннигиляции пара-Ps в общий процесс аннигиляции составляет ~6.5% (случай $d \ll a$, где d — ширина квантовой ямы, a — боровский радиус Ps). Именно такого типа состояния пара-Ps могут наблюдаться в прецизионных экспериментах при температуре жидкого гелия.

1. Применение пучков медленных позитронов [1] позволяет получать информацию о природе позитронных и электронных состояний и механизме процесса аннигиляции в сверхтонких слоях полупроводников, в том числе и в полупроводниковых структурах с квантовыми ямами [2]. В настоящем сообщении рассчитываются аннигиляционные характеристики позитрония (Ps) в полупроводниковых структурах с квантовыми ямами (например, чередующиеся слои $GaAs - Al_xGa_{1-x}As$ и $Ge - Ge_xSi_{1-x}$) в рамках экситонной модели Ал. Эфроса [3]. Эта теория построена в приближении метода эффективной массы и в предположении, что волновые функции электронов и позитронов равняются нулю на поверхности раздела $GaAs—Al_xGa_{1-x}As$, что соответствует нахождению фермионов в бесконечно глубокой потенциальной яме. В этом случае характер влияния размерного квантования на энергетический спектр Ps зависит от соотношения толщины ямы d и боровского радиуса Ps a.

2. Рассмотрим вначале наиболее интересный случай размерного квантования, когда $d \ll a$. В работе [4] было показано, что зоны электронов и позитронов в кристалле могут иметь простой параболический вид с эффективными массами m_e и m_p соответственно. Следуя работе [3], запишем уравнение Шредингера, описывающее движение фермионов в квантовой яме:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\partial^2}{\partial z_e^2}+V(z_e)-\frac{\hbar^2}{2m_p}\frac{\partial^2}{\partial z_p^2}+V(z_p)-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\frac{\rho\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)-\right.$$
$$\left.-\frac{e^2}{\varepsilon\sqrt{\rho^2+|z_p-z_e|^2}}\right]\Psi(\mathbf{r}_e,\mathbf{r}_p)=\left(E-\frac{P_\perp^2}{2M}\right)\Psi(\mathbf{r}_e,\mathbf{r}_p). \tag{1}$$

Здесь $M = m_e + m_p$ — масса Ps, $P_\perp^2 = P_x^2 + P_y^2$, а P_x, P_y — компоненты импульса Ps в плоскости квантовой ямы, $\mu = m_e m_p / (m_e + m_p)$ — приведенная масса, ε — статическая диэлектрическая проницаемость, $\rho = [(x_e - x_p)^2 + (y_e - y_p)^2]^{1/2}$, $\varphi = \mathrm{arctg}\,[(x_e - x_p) / (y_e - y_p)]$ — относительные координаты электрона и позитрона. Ось z совпадает с направлением, перпендикулярным поверхности квантовой ямы. Потенциал ямы имеет вид

$$V(z) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 < z < d, \\ \infty & \text{при } z < 0 \text{ и } z > d. \end{cases} \tag{2}$$

При условиях $d \ll a$ может произойти полное разделение переменных на одномерное движение фермионов в потенциале $V(z)$ и движение двумерного Ps с приведенной массой μ в плоскости (x, y) квантовой ямы. В работе [3] были определены также поправки к энергии связи Ps, обусловленные конечностью толщины квантовой ямы d. Исследования в рамках теории возмущений показали, что полная волновая функция Ps при этом может быть записана в виде

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i(P_X X + P_Y Y)/\hbar} \varphi_{m,t}(\rho)\, \Psi_{N_e}(z_e)\, \Psi_{N_p}(z_p), \tag{3}$$

где S — площадь квантовой ямы, X, Y — компоненты вектора $\mathbf{R} = (m_e\mathbf{r}_e + m_p\mathbf{r}_p) / (m_e + m_p)$ в плоскости квантовой ямы, $\varphi_{m,t}(\rho)$ — нормированная волновая функция двумерного Ps, даваемая выражением

$$\varphi_{m,t}(\rho) = -\frac{4\exp(im\varphi - \zeta/2)}{a(|2m| + 2t + 1)\sqrt{2}\,\pi} \times$$
$$\times \sqrt{\frac{(|2m| + t)}{(|6m| + 2t + 1)(|4m| + t)}} \quad L^{|2m|}_{|2m| + t}(\zeta). \tag{4}$$

Здесь $\zeta = 4\rho/(|2m| + 2t + 1)a$, $L^{\beta}_{\alpha}(\zeta)$ — присоединенные полиномы Лагерра, $a = \hbar^2\varepsilon / \mu e^2$ — боровский радиус Ps, $t = 0, 1, 2 \ldots$. С учетом поправки к энергии в первом порядке теории возмущений уровни энергии для состояния с проекцией m момента на ось z определяются выражением

$$\varepsilon_{m,t} = -\frac{e^2}{2\varepsilon a}\frac{1}{(t + |m| + 1/2)^2} +$$
$$+ \frac{e^2}{\varepsilon a}\frac{d}{a}\frac{16}{(2t + 1)^2}\left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{1}{N_e} + \frac{1}{N_p} + \frac{\delta_{N_e, N_p}}{2N_e^2}\right)\right], \tag{5}$$

где $\delta_{i,\,j}$ — символ Кронеккера.

Волновые функции $\Psi_{N_i}(z_i)$ в (3) имеют вид

$$\Psi_N(z) = \sqrt{2/d}\ \sin(\pi N z/d), \tag{6а}$$

а уровни энергии электронов и позитронов, соответствующие этим состояниям, равны

$$E_N^{e,p} = \hbar^2\pi^2 N_{e,p}/2m_{e,p}d^2, \quad (N_{e,p} = 0, 1, 2 \ldots). \tag{6б}$$

В рамках известных методов [4] на волновой функции (3) можем вычислить вероятность 2γ-аннигиляции пара-Ps в квантовой яме

$$W_s = 4\pi r_0 c\rho = 4\pi r_0^2 c \left| \int d^3\mathbf{r}_e d^3\mathbf{r}_p \delta(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p) \,|\, \Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) \,|\right|^2 S. \tag{7}$$

Вычисления дают

$$W_s = 4\pi r_0^2 c \frac{16}{(2t + 1)^2}\frac{1}{a^2}\frac{3}{2d}, \quad c^{-1}. \tag{8}$$

Такого же типа выражение получаем для вероятности 3γ-аннигиляции орто-Ps.

$$W_t = 4\pi r_0^2 c \frac{4}{9} \frac{\alpha}{\pi} (\pi^2 - 9) \frac{16}{(2t+1)^2} \frac{1}{a^2} \frac{3}{2d}, \quad c^{-1}. \tag{9}$$

Несложные расчеты позволяют записать выражение для времени жизни пара- и орто-Ps

$$\tau_s = 1.25 \cdot 10^{-10} (2t+1)^2 \frac{d}{a_0} \frac{\varkappa_{\text{кр}}^r}{602.88}, \ c; \tag{10}$$

$$\tau_t = 1.4 \cdot 10^{-7} (2t+1)^2 \frac{d}{a_0} \frac{\varkappa_{\text{кр}}^2}{602.88}, \ c. \tag{11}$$

Здесь a_0 — боровский радиус основного состояния атома водорода, а параметр $\varkappa_{\text{кр}}$ равен

$$\varkappa_{\text{кр}} = \varepsilon m/2\mu, \tag{12}$$

где m — масса свободного фермиона.

Угловое распределение аннигиляционных фотонов (УРАФ) процесса 2γ-аннигиляции пара-Ps дается выражением

$$W(\mathbf{k}) = \pi r_0^2 c \rho_{\mathbf{K}}(\mathbf{k}) =$$

$$= \pi r_0^2 \sum_{\mathbf{K}} \left| \int \Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p)} d^3\mathbf{r}_e d^3\mathbf{r}_p \delta(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p) \right|^2 f(\mathbf{K}, T), \tag{13}$$

где $\mathbf{K}$ — волновой вектор центра масс Ps, а $f(\mathbf{K}, T)$ — максвелловская функция распределения по импульсам двумерного Ps, равная

$$f(\mathbf{K}, T) = (2\pi M k_0 T)^{-2} \exp[-(K_x^2 + K_y^2)/2Mk_0T]. \tag{14}$$

Здесь k_0 — постоянная Больцмана, а T — температура.

Отметим, что в экспериментах измеряются кривые УРАФ, определяемые выражением

$$P(k_z) = Q(k_z)/Q(0), \quad Q(k_z) = 2\pi \int W(k)\, k dk. \tag{15}$$

Вычисления функции $P(k_z)$ для (x, y) плоскости квантовой ямы и в направлении, перпендикулярном плоскости (x, y), дают совершенно разные результаты. Для направления, параллельного плоскости (x, y), величина $W(\mathbf{k})$ получается равной

$$W(\mathbf{k}) = BK \exp(-K^2/2Mk_0T). \tag{16}$$

Таким образом, кривые УРАФ определяются выражением

$$P(k_z) = I_N(\Theta) = \exp(-K_z^2/2Mk_0T). \tag{17}$$

Здесь функция $I_N(\Theta)$ — так называемая узкая компонента в кривых УРАФ, обусловленная 2γ-аннигиляцией пара-Ps. Полуширина узкой компоненты, полная ширина кривой $P(k_z)$, на полувысоте в максимуме, исходя из (17), равна

$$\Gamma_N \approx 4.4 \cdot 10^{-2} \cdot T^{1/2} \cdot M/M_0, \text{ мрад}, \tag{18}$$

здесь $M_0 = 2m$.

В случае направления, перпендикулярного плоскости (x, y) квантовой ямы, величина $W(\mathbf{k})$ определяется выражением

$$W(\mathbf{k}) = \pi r_0^2 c \int \Psi_N^2(z)\, e^{-ikz} dz = \frac{2}{d} \pi r_0^2 c \int\limits_0^d \sin^2(\pi N z/d)\, e^{-ikz} dz. \qquad (19)$$

Вычисления $W(\mathbf{k})$ по формуле (19) и подстановка в (15) дают выражение для кривых УРАФ вида

$$P(k_z) = (4\pi^2 N^2/d^2)/(4\pi^2 N^2/d^2 + |k_z|^2). \qquad (20)$$

Отсюда легко определяется полуширина узкой компоненты

$$\Gamma_N = 14.6 \cdot \pi N/d, \text{ мрад}. \qquad (21)$$

Заметим, что аналогичным образом определяются кривые допплеровского уширения аннигиляционной линии $P(\Delta E_x)$ и их полуширины для случая аннигиляции пара-Ps в квантовых ямах, где $\Delta E_x = c p_x$.

Вероятность 3γ-аннигиляции орто-Ps в квантовых ямах с учетом (11) запишется в виде

$$P_{3\gamma} = I_2 \frac{\tau_2}{\tau_t^0 (d/a_0)(\varkappa_{\text{кр}}^2/602.88)} + \frac{1}{372}\left(1 - \frac{4}{3} I_2\right), \qquad (22)$$

где I_2 — интенсивность долгоживущей компоненты, а τ_2 — время жизни относительно «pick-off»-аннигиляции орто-Ps в квантовых ямах.

Далее интересно вычислить параметр магнитного тушения Q орто-Ps, определяющий действие магнитного поля на аннигиляционные характеристики $I_N(\Theta) = P(k_z)$, $P(\Delta E_x)$, $P_{3\gamma}$ и I_2 [5]:

$$Q = Q_0 \frac{\mu_0^2 \, |\Psi_0(0)|^2}{\mu_e \mu_p \, |\Psi(0)|^2}. \qquad (23)$$

Здесь

$$Q_0 = (2\mu_0 H/\Delta W_0)^2 \frac{\tau_2}{\tau_s^0} \qquad (24)$$

— параметр магнитного тушения орто-Ps в вакууме, где μ_0 — магнитный момент свободного электрона, $\Delta W_0 = \frac{56}{3}\pi\mu_0^2 \, |\Psi_0(0)|^2$ — превышение энергии орто-Ps над пара-Ps, $\tau_s^0 = 1.25 \cdot 10^{-10}$ с — время жизни пара-Ps в вакууме, τ_2 — измеряемое в экспериментах время жизни орто-Ps, обусловленное «pick-off»-аннигиляцией, $\mu_{e,p}$ — магнитные моменты фермионов в квантовой яме, $|\Psi_0(0)|^2 = 1/8\pi a_0^3$ — электронная плотность в нуле для Ps в вакууме, а $|\Psi(0)|^2$ — аналогичная величина для Ps в квантовой яме.

Вычисления в рамках модели Ал. Эфроса [3] дают

$$Q = Q_0 \frac{d}{a_0} \frac{24\pi(2t+1)^2 (m_e + m_p)^2}{m_e m_p}. \qquad (25)$$

Таким образом, эффективное магнитное поле, действующее на орто-Ps в квантовой яме, равно

$$H_{эфф} = H \cdot 8.68\,(2t+1)\,\varepsilon\,(d/a_0)^{1/2}\,\frac{(m_e+m_p)}{(m_e m_p)^{1/2}}\,. \tag{26}$$

Например, при $m_e = m_p = m^*$ и $t = 0$

$$H_{эфф} = H \cdot 17.36\varepsilon\,(d/a_0)^{1/2}. \tag{27}$$

Для наглядности выпишем относительные изменения основных характеристик аннигиляции Ps при действии внешнего магнитного поля [6]:

$$\frac{\Delta I_N}{I_N(0)} = \frac{I_N(H) - I_N(0)}{I_N(0)} = Q/(1+Q), \tag{28}$$

$$\omega_{3\gamma} = P_{3\gamma}(H)/P_{3\gamma}(0) = \frac{2}{3} + \frac{1}{3}(1+Q)^{-1}, \tag{29}$$

$$R(H) = I_2(H)/I_2(0) \approx \frac{1}{3}\,[2 + \exp(-Q)]. \tag{30}$$

Здесь символы H и 0 означают значения аннигиляционных параметров в присутствии магнитного поля и в его отсутствие.

3. Теперь рассмотрим случай $d \gg a$, следуя работе [3]. Самой большой энергией является энергия связи Ps. Влияние поверхности на E_{Ps} является экспоненциально слабым и волновую функцию Ps можно представить в виде

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) = \varphi(\rho)\,\frac{1}{\sqrt{S}}\,\exp\,[i\,(P_X X + P_Y Y)/\hbar]\,\Psi_N(z), \tag{31}$$

где $\rho = |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|$, $Z = (m_e z_e + m_p z_p)/M$, $\varphi(\rho)$ — волновая функция относительного движения, соответствующая основному состоянию Ps, $\Psi_N(z)$ выражается формулой (6а) и описывает движение центра масс Ps в направлении, перпендикулярном плоскости (x, y) квантовой ямы с учетом граничных условий на поверхности.

Постановка выражения (31) в (7) и (8) позволяет вычислить времена жизни экситонного состояния Ps [5]:

$$\tau_s = 1.25 \cdot 10^{-10}\,(\varepsilon m/2\mu)^3, \tag{32}$$

$$\tau_t = 1.4 \cdot 10^{-7}\,(\varepsilon m/2\mu)^3. \tag{33}$$

Кривые УРАФ и их полуширины Γ_N, вычисленные на волновой функции (31), для направления, параллельного плоскости (x, y) квантовой ямы, даются выражениями (17) и (18), в то время как для направления, перпендикулярного плоскости (x, y), они определяются выражениями вида

$$P(k_z) = (\pi^2 N^2/d^2)/(\pi^2 N^2/d^2 + |k_z|^2), \tag{34}$$

$$\Gamma_N = 7.3\pi N/d,\ \text{мрад}. \tag{35}$$

Параметр Q магнитного тушения орто-Ps может быть записан в виде [5]

$$Q = Q_0 \varepsilon^3\;\frac{m\,(m_e+m_p)^3}{8 m_e^2 m_p^2}\,, \tag{36}$$

т. е. эффективное магнитное поле, действующее на орто-Ps в квантовой яме, равно

$$H_{\text{эфф}} = H \left(\varepsilon^3 \frac{m\,(m_e + m_p)^3}{8m_e^2 m_p^2} \right)^{1/2}, \tag{37}$$

так что при $m_e = m_p = m^*$

$$H_{\text{эфф}} = H \sqrt{\varepsilon^3 \frac{m}{m^*}}\,. \tag{38}$$

Для вероятности 3γ-аннигиляции можем записать выражение

$$P_{3\gamma} = I_2 \frac{\tau_2}{\tau_t^0\,(\varepsilon m/2\mu)^3} + \left(1 - \frac{4}{3} I_2\right) \frac{1}{372}\,. \tag{39}$$

4. Приведем некоторые численные оценки аннигиляционных характеристик Ps в случае GaAs ультратонкой квантовой ямы ($d = 2a$) ($a = 5.64$ Å, $\varepsilon = 12.5$, $m_e = 0.0665\ m$). Эффективная масса позитрона в GaAs неизвестна, поэтому принимаем $m_p \approx m$. Параметр $\varkappa_{\text{кр}} = 100, 8$, так что $a = 53.43$ Å. В случае $d \ll a$ оценки по формулам (10), (11), (18), (21), (25) и (26) дают $\tau_s = 4.48 \times 10^{-8}$ с, $\tau_t = 5.02 \cdot 10^{-5}$ с, $\Gamma_N\,[\parallel (x, y)] \approx 0.406$, $\Gamma_N\,[\perp (x, y)] = 2.15$ мрад, $Q = 4.64 \cdot 10^6\ Q_0$, $H_{\text{эфф}} = 2.15 \cdot 10^3\ H$. В случае GaAs квантовой ямы толщиной 564 Å уже удовлетворяется условие $d \gg a$. Оценки по формулам (32), (33), (18), (35), (36) и (37) дают: $\tau_s = 1.29 \cdot 10^{-4}$ с, $\tau_t = 1.45 \cdot 10^{-1}$ с, $\Gamma_N\,[\parallel (x, y)] \approx 0.406$, $\Gamma_N\,[\perp (x, y)] = 0.02$ мрад, $Q = 7.85 \cdot 10^5\ Q_0$, $H_{\text{эфф}} = 8.9 \cdot 10^3\ H$. Аналогичные оценки для «кремниевой» квантовой ямы дают при $d \ll a$ ($a = 5.43$ Å, $\varepsilon = 12$, $m_e = 0.26\ m$, $m_p \approx m$, $d = 2a$) $\varkappa_{\text{кр}} = 29.08$, $\tau_s = 3.57 \cdot 10^{-9}$ с, $\tau_t = 4 \cdot 10^{-6}$ с; $\Gamma_N\,[\parallel (x, y)] = 0.48$, $\Gamma_N\,[\perp (x, y)] = 2.24$ мрад, $Q = 1.36 \cdot 10^6\ Q$, $H_{\text{эфф}} = 1.17 \cdot 10^3\ H$, а при $d \gg a$ ($a = 543$ Å): $\tau_s = 2.44 \cdot 10^{-6}$ с, $\tau_t = 3.41 \cdot 10^{-3}$ с, $\Gamma_N\,[\parallel (x, y)] = 0.48$, $\Gamma_N\,[\perp (x, y)] = 0.02$ мрад, $Q = 5.07 \cdot 10^3\ Q_0$, $H_{\text{эфф}} = 750\ H$. Примерно такого же порядка результаты получаются и для «германиевой» квантовой ямы. Заметим также, что полная вероятность аннигиляции Ps в квантовой яме может быть записана в виде

$$\lambda_s = W_s + \lambda_{B-R}, \quad \lambda_t = W_t + \lambda_{B-R}, \tag{40}$$

где λ_{B-R} — вероятность аннигиляции позитрона, входящего в состав Ps, на валентных электронах GaAs и Si. Она может быть определена по методу Брандта—Райнхаймера [7]:

$$\lambda_{B-R} = \lambda_0\,(r_s)\,\{1 + f(r_s\,,\ E_g)\,[\xi\,(\eta_s) - 1]\}\,, \tag{41}$$

где $\lambda_0\,(r_s) = 12.0\ r_s^{-3}$, нс$^{-1}$; $r_s = (^3/_4\pi n)^{1/3}$, n — число электронов в 1 см^3, а $f\,(r_s, E_g) \approx 0.8$. Для GaAs $\lambda_{B-R} \approx 4.3$, а в Si $\lambda_{B-R} \approx 4.08$ нс$^{-1}$.

Таким образом, приведенные оценки говорят, что аннигиляционные характеристики двумерного Ps в квантовых ямах при $d \ll a$ имеют ярко выраженные аномалии: высокие значения времен жизни τ_s и τ_t по сравнению с временами жизни τ_s^0 и τ_t^0 свободного Ps, аномалии в величинах Γ_N для направлений, параллельных и перпендикулярных плоскости (x, y) квантовой ямы, суперсильное действие внешнего магнитного поля на основные характеристики аннигиляции (28)—(30). То же самое свойственно и аннигиляционным характеристикам Ps при $d \gg a$. Особое внимание следует обратить здесь на полуширину $\Gamma_N\,[\perp (x, y)] \to 0$ [очень резкое сужение $I_N\,(\Theta)$ в направлении, перпендикулярном плоскости (x, y) квантовой ямы]. Однако наблюдать такого типа состояния Ps в квантовых ямах не так просто из-за высокой вероятности аннигиляции Брандта—Райнхаймера на валентных электронах полупроводника. Например, из наших данных в кремнии для случая $d \ll a : \lambda_s = W_s + \lambda_{B-R} = 0.28 + 4.08 = 4.28$ нс$^{-1}$, так что $\tau_s^{\text{общ}}$^=^2.34×10^{-10} с, что удовлетворительно согласуется с экспериментальным значением $\tau_1 = (2.28 \pm 0.01) \cdot 10^{-10}$ с [6]. Вклад собственной аннигиляции пара-Ps в общий процесс аннигиляции составляет порядка 6.5% (наибольший эффект). Такого типа состояния пара-Ps уже могут наблюдаться в прецизионных экспериментах при температуре жидкого гелия. В заключение отметим, что приведенные результаты по расчету аннигиляционных характеристик Ps в квантовых ямах могут быть использованы для оценок свойств Ps в очень тонких без «pick-off»-аннигиляционных квантовых ямах (вакуумная щель), создаваемых с помощью электрического поля и скрещенных электрического и магнитного полей [8].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] K. G. Lynn. Helv. Phys. Acta, 6, 389 (1990).
[2] Е. П. Прокопьев. Деп. в ВИНИТИ. М. (1991).
[3] Ал. Л. Эфрос. ФТП, 20, 1281 (1986).
[4] Е. П. Прокопьев. Деп. в ЦНИИ «Электроника». М. (1982).
[5] В. И. Гольданский, Е. П. Прокопьев. Письма ЖЭТФ, 4, 422 (1966).
[6] Е. П. Прокопьев. Деп. в ЦНИИ «Электроника». М. (1979).
[7] W. Brandt, J. Reinheimer. Phys. Rev. B, 8, 3104 (1970).
[8] Л. А. Буркова, И. Е. Дзялошинский, Г. Ф. Друкарев, Б. С. Монозон. ЖЭТФ, 71, 526 (1976).

Редактор: В. В. Чалдышев