

УРОВНИ, СОЗДАВАЕМЫЕ КОРОТКОДЕЙСТВУЮЩИМ ПОТЕНЦИАЛОМ ДЕФЕКТОВ И ПРИМЕСЕЙ, В КВАНТОВЫХ ЯМАХ НА ОСНОВЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВ ТИПА $A^{IV}B^{VI}$

Дугаев В. К., Петров П. П.

В последнее время значительное внимание уделяется изучению квантовых ям на основе узкощелевых полупроводников типа $A^{IV}B^{VI}$ и их твердых растворов [1]. Так, в работах [2-4] рассмотрен электронный спектр в квантовых ямах на основе структур типа $PbTe-Pb_{1-x}Sn_xTe-PbTe$, когда носители захватываются в слой твердого раствора $Pb_{1-x}Sn_xTe$ с меньшей шириной запрещенной зоны (особый случай возникновения безмассовых состояний в инверсном контакте [5] мы не рассматриваем).

Обычно легирование примесями структур указанного типа производится таким образом, чтобы сама примесь находилась вне квантовой ямы [6]. Однако в реальных системах примеси или дефекты могут все же оказаться внутри ямы, в силу чего представляет определенный интерес изучение поведения примесных уровней в квантовых ямах. Подобная задача для случая широкозонных полупроводников рассматривалась в ряде работ (см., например, [7] и цитированную там литературу).

В настоящей работе рассмотрены примесные уровни в квантовой яме на основе узкощелевых полупроводников $A^{IV}B^{VI}$, создаваемые короткодействующим потенциалом. Радиус действия потенциала примеси a предполагается таким, что выполняются условия

$$L \ll a \ll k_{\max}^{-1}, \quad (1)$$

где L — ширина ямы, $k_{\max} \approx mv$ — характерный импульс, ограничивающий область линейного спектра в рассматриваемых соединениях, m и v — параметры этого спектра (численные оценки приведены далее).

Получим вначале эффективный гамильтониан для электронов в квантовой яме без примесей и дефектов. В качестве исходной примем изотропную модель Дирака, которая достаточно хорошо описывает энергетический спектр электронов в соединениях $A^{IV}B^{VI}$

$$H_0 = \tau_x \Delta(z) - i v \tau_x \sigma \nabla, \quad (2)$$

где τ и σ — матрицы в пространстве зон и спина соответственно, v — параметр межзонного взаимодействия; параметр энергетической щели $\Delta(z)$ предполагается имеющим следующую координатную зависимость:

$$\Delta(z) = \begin{cases} \Delta_0, & -L/2 \leq z \leq L/2, \\ \Delta, & |z| > L/2. \end{cases} \quad (3)$$

В интервале энергий $\Delta_0 < \epsilon < \Delta$ электроны связаны внутри ямы и их волновая функция при $|z| \leq L/2$ $\psi \sim \exp(ikz)$, где $k = (\epsilon_x^2 - \Delta_0^2)^{1/2}$. Энергия ϵ_x (положение дна n -й подзоны размерного квантования) определяется из условий сшивки решений уравнения Шредингера в яме и вне ее.¹

Подставляя в волновое уравнение с гамильтонином (2) волновую функцию внутри ямы в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_1(x, y) \exp(ikz) \quad (4)$$

и переходя к фурье-преобразованию по x и y , получим

$$H_0(\mathbf{k}) = \tau_x \Delta_0 + v \tau_x (\sigma_x k_x + \sigma_y k_y) + v \tau_x \sigma_z k_x. \quad (5)$$

¹ Соответствующие выражения и графики приведены в работе авторов (ФТП. 1989. Т. 23. В. 3. С. 488—492), а также в [4].

При $k = 0$ гамильтониан (5) преобразуется к диагональному виду с помощью унитарного преобразования, задаваемого матрицей,

$$T = [2\varepsilon_n(\varepsilon_n - \Delta_0)]^{-1/2} [v\sigma_x + i\tau_y(\Delta_0 - \varepsilon_n)], \quad T^{-1} = T^+. \quad (6)$$

При этом

$$\tilde{H}_0(\mathbf{k}) = T^+ H_0 T = \tau_x \varepsilon_n - v\tau_x(\sigma_x k_x + \sigma_y k_y). \quad (7)$$

Гамильтониан (7) имеет размерность 4×4 , однако путем еще одного преобразования с матрицей

$$T_1 = 1 \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \tau_x \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (8)$$

он приводится к блочному виду

$$H_{\alpha\beta\phi} = T_1^+ \tilde{H}_0 T_1 = \tilde{H}_1 \oplus \tilde{H}_2, \quad (9)$$

где

$$\tilde{H}_{1,2} = \pm \varepsilon_n \rho_x - v(\rho_x k_x + \rho_y k_y). \quad (10)$$

Здесь ρ — матрицы Паули в пространстве волновых функций, являющихся линейными комбинациями волновых функций с определенными спинами и принадлежащих различным зонам (т. е. матрицы ρ не являются чисто спиновыми).

Важно отметить, что каждый из гамильтонианов $\tilde{H}_{1,2}$ является гамильтонианом массивной 2+1-мерной квантовой электродинамики (КЭД), для которой в качестве матриц Дирака могут быть выбраны матрицы Паули. Однако полный гамильтониан, согласно (9) и (10), представляет собой совокупность двух гамильтонианов 2+1-мерной КЭД (соответствующий параметр mc^2 в КЭД), что связано с сохранением двукратного вырождения в зонах.

Введем теперь короткодействующий потенциал примеси $V(\mathbf{r})$, диагональный в базисе исходных волновых функций, в котором записан H_0 . Преобразования базиса не меняют его вида. В силу первого из неравенств (1) матричными элементами $V(\mathbf{r})$ на волновых функциях различных подзон можно пренебречь, а второе из них позволяет аппроксимировать $V(\mathbf{r})$ двумерным δ -потенциалом $V(\mathbf{r}) = V_0 \delta(x) \delta(y)$.

Уравнение для определения положения уровней имеет вид [7]

$$\det [1 - V_0 F(\omega)] = 0, \quad (11)$$

где

$$F(\omega) = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} G(\mathbf{k}, \omega), \quad (12)$$

$G(\mathbf{k}, \omega)$ — функция Грина свободных электронов. В соответствии с отмеченным выше двукратным вырождением, которое сохраняется и для уровней, достаточно ограничиться гамильтонианом \tilde{H}_1 из (10). Тогда

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\omega + \rho_x \varepsilon_n + v(\rho_x k_x + \rho_y k_y)}{\omega^2 - \varepsilon_n^2 - v^2 k^2}. \quad (13)$$

Вычисляя с этой функцией интеграл в (12), получим

$$F(\omega) = -\frac{\omega + \rho_x \varepsilon_n}{2\pi v^2} \ln \frac{E_c}{(\varepsilon_n^2 - \omega^2)^{1/2}}, \quad (14)$$

где E_c — энергия, на которой производится обрезание интеграла ($E_c \approx mv^2$). Вид этой функции (диагональные компоненты матрицы) представлен на рисунке.

Пусть в дальнейшем для определенности $V_0 < 0$ — притягивающий потенциал для электронов (донорные уровни). С помощью (14) решения уравнения (11) могут быть найдены в следующих предельных случаях (далее ω_n — энергия уровня, отщепленного от n -й подзоны): а) при $|V_0| \ll v^2/\varepsilon_n \ln(E_c/\varepsilon_n) \sim v^2/\varepsilon_n$

$$\omega_n = \varepsilon_n - \frac{E_c^2}{2\varepsilon_n} \exp\left(-\frac{2\pi v^2}{\varepsilon_n |V_0|}\right), \quad (15)$$

б) при $1 \leq |V_0| \varepsilon_n \ln(E_c/\varepsilon_n)/v^2 \ll (E_c/\varepsilon_n)^2$

$$\omega_n = -\varepsilon_n + \frac{2\pi v^2}{|V_0| \ln(E_c/\varepsilon_n)}, \quad (16)$$

в) при $|V_0| > (vE_c)^2/\varepsilon_n^2$

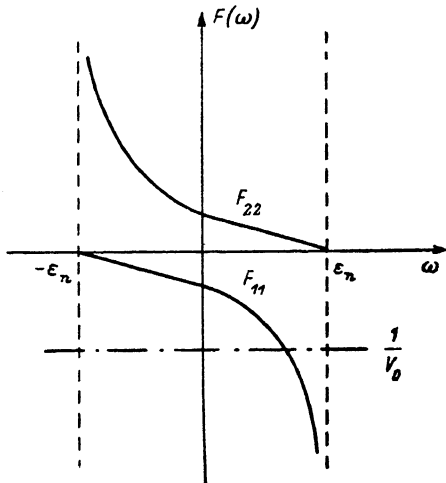
$$\omega_n = -\varepsilon_n + \frac{4\pi v^2}{|V_0|}. \quad (17)$$

Зависимость положения уровней от ширины ямы содержится в параметре ε_n : для всех n с ростом L эта величина монотонно уменьшается и стремится к Δ_0 .

Мы не приводим графиков этих зависимостей, поскольку наше рассмотрение ограничено со стороны больших L условием (1).

Отметим, что отсутствие затухания примесных состояний в области $|\omega| < \varepsilon_n$ в соответствии с (11) и (14) связано с предполагаемой малостью «перемешивания» состояний различных подзон на потенциале $V(\mathbf{r})$.

Строго говоря, потенциал $V_0 < 0$ отщепляет также виртуальный уровень от n -й валентной подзоны с энергией $\tilde{\omega}_n >$



Вид функции $F(\omega)$ и графическое решение уравнения (11) для уровня, отщепленного от n -й подзоны при $V_0 < 0$.

$> \varepsilon_n$. Однако его размытие не меньше ω_n , т. е. реально имеет место слабое гладкое возмущение плотности состояний в верхней подзоне размерного квантования, которым можно пренебречь.

Сделаем оценки применимости полученных выражений. Примем значения для параметров зонной структуры $v=5 \cdot 10^{-8}$ эВ·см и $m=0.2 m_0$. Тогда $k_{\max} \sim 10^{-7}$ см $^{-1}$, и, следовательно, полученные формулы применимы для узкой квантовой ямы в несколько атомных слоев.

Список литературы

- [1] Bauer G. // Surf. Sci. 1986. V. 168. N 1-2. P. 462—472.
- [2] Силян А. П. // Кр. сообщ. по физике ФИ АН СССР. М., 1985. № 12. С. 13—16.
- [3] Lopez Gonder J., de Dios Leyva M. // Phys. St. Sol. (b). 1987. V. 142. N 2. P. 445—453.
- [4] Кисин М. В., Петросян В. И. // ФТП. 1988. Т. 22. В. 5. С. 829—833.
- [5] Волков Б. А., Панкратов О. А. // Письма ЖЭТФ. 1985. Т. 42. В. 4. С. 145—148.
- [6] Esaki L. // IEEE Quant. Electron. 1986. V. QE-22. N 9. P. 1611—1624.
- [7] Bastard G. // Lect. Not. Phys. 1980. V. 133. P. 337—354.

Львовский
политехнический институт
им. Ленинского комсомола

Получено 23.03.1989
Принято к печати 17.07.1989

ФТП, том 23, вып. 12, 1989

ПОЛИТИПНЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД, ИНДУЦИРОВАННЫЙ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИЕЙ

Москвина Д. Р., Пецольдт Й.,
Потапов Е. Н., Таиров Ю. М.

Ионная имплантация является наиболее эффективным методом для получения локально легированных областей с заданными параметрами в полупроводниковых материалах. В полупроводниках, обладающих множеством структурно