

Эффекты деполяризации и фотоионизация квантовых ям

© А.Г. Петров, А.Я. Шик

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 15 августа 1996 г. Принята к печати 16 сентября 1996 г.)

Теоретически исследовано влияние деполяризационных эффектов на спектры межподзонного оптического поглощения в квантовых ямах. В общем случае матричные элементы соответствующих переходов определяются из решения системы интегральных уравнений. Для ям, содержащих связанное или квазисвязанное состояние с малой энергией, задача существенно упрощается и сводится к системе алгебраических уравнений, позволяющих найти матричные элементы в явном виде. Показано, что спектр поглощения совпадает со спектром, полученным без учета деполяризации для квантовой ямы меньшей глубины или ширины. В частности, для ям с мелким связанным состоянием пик поглощения, обусловленный переходами в это состояние, с ростом уровня легирования достигает порога фотоионизации, после чего перестает проявляться.

1. Введение

Эффекты внутризонного оптического поглощения в квантовых ямах (КЯ), связанные с переходами носителей с локализованных уровней в континуум состояний над КЯ, являются в последние годы объектом достаточно интенсивного экспериментального исследования, что во многом обусловлено использованием этих эффектов для создания нового типа приемников инфракрасного излучения [1]. Целый ряд работ посвящен и теоретическому исследованию фотоионизации КЯ (см., например, [2–6]). Вместе с тем важный вопрос о влиянии эффектов деполяризации при значительной концентрации носителей в КЯ на спектры и кинетику фотоионизации остается мало изученным. Ситуация здесь значительно сложнее, чем для случая перехода между двумя дискретными уровнями, обсуждавшегося, в частности, в [7]. Характер зависимости спектров поглощения от концентрации носителей в КЯ обсуждался в работах [8–10], однако примененный там подход является весьма приближенным и полученные результаты могут отличаться от реальной картины не только количественно, но иногда и качественно. Одним из наиболее серьезных упущений в указанных работах является, в частности, пренебрежение нелокальностью связи между электрическим полем и поляризацией.

Данная работа представляет собой попытку более строгого рассмотрения спектров фотоионизации КЯ и некоторых других родственных эффектов, связанных с явлениями деполяризации в структурах с двумерным электронным газом. Предварительные результаты работы были опубликованы в [11].

2. Основные уравнения

Рассмотрим КЯ произвольной формы $U(z)$, полагая для определенности, что $U(-\infty) = U(\infty) = 0$, причем стремление $U(z)$ к нулю при $z \rightarrow \pm\infty$ происходит достаточно быстро, не медленнее чем экспонен-

циально¹. Пусть в КЯ имеется N связанных состояний с энергиями $E_n < 0$ и волновыми функциями $\psi_n(z)$ ($n = 0, 1, \dots, N-1$). Состояния континуума над КЯ будут характеризоваться непрерывным спектром энергий $E > 0$ и описываться делокализованными волновыми функциями $\psi_E(z)$ с условием нормировки $\int \psi_E^*(z)\psi_{E'}(z)dz = \delta(E - E')$.

Мы ограничимся случаем не слишком высокой концентрации носителей n_s , когда они заполняют лишь основную подзону КЯ, и будем изучать внутризонные оптические свойства системы, обусловленные электронными переходами с уровня $n = 0$ в выше лежащие состояния под влиянием света с частотой ω , поляризованного вдоль оси z (ТМ-мода). Основной характеристикой, определяющей эти свойства и подлежащей вычислению, является оптический матричный элемент $P_{\nu 0} = (ie/\omega) \int j_{\nu 0}^*(z)F(z)dz$, где ν — квантовое число конечного состояния (n или E соответственно для локализованных и делокализованных состояний), F — напряженность высокочастотного электрического поля, $j_{\nu 0} = (i\hbar/2m)[\psi_0(d\psi_\nu^*/dz) - (d\psi_0/dz)\psi_\nu^*]$ — ток перехода.

Сложность вычисления $P_{\nu 0}$ при наличии деполяризации связана с тем, что истинное распределение электрического поля света $F(z)$ неизвестно и должно находиться самосогласованным образом. Заданной может считаться лишь F_0 — величина поля на достаточном удалении от слоя электронов, где их экранирующее влияние отсутствует. Вместе с тем, для z -поляризации света электрическая индукция D будет не зависеть от z и равняться $\varepsilon_\infty F_0$, где ε_∞ — решеточная диэлектрическая проницаемость. Что касается величины поля $F(z)$, то в рассматриваемых нами квантовых слоях она связана с D нелокальным образом: $D(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon_{zz}(z, z')F(z')dz'$.

Согласно выражениям, полученным в [12], для двумерной квантовой системы интересующая нас компонента нелокальной диэлектрической проницаемости в прибли-

¹ При необходимости результаты нетрудно обобщить и на несимметричный случай $U(-\infty) \neq U(\infty)$

жении случайных фаз может быть записана в виде

$$\begin{aligned} \varepsilon_{zz}(z, z') = \varepsilon_\infty(z - z') - 8\pi n_s e^2 \hbar^3 \\ \times \left\{ \sum_{n=1}^{N-1} \frac{j_{n0}(z) j_{n0}^*(z')}{(E_n - E_0)[\hbar^2 \omega^2 - (E_n - E_0)^2]} \right. \\ \left. + \int_0^\infty \frac{j_{E0}(z) j_{E0}^*(z') dE}{(E - E_0)[\hbar^2 \omega^2 - (E - E_0)^2]} \right\}. \quad (1) \end{aligned}$$

Умножим уравнение (1) на $F(z') j_{E0}^*(z)$ и проинтегрируем в бесконечных пределах по z и z' . Результат имеет вид

$$\begin{aligned} P_{E0}^0 = P_{E0} - \frac{8\pi n_s e^2 \hbar^3}{\varepsilon_\infty} \\ \times \left\{ \sum_{n=1}^{N-1} \frac{P_{n0} \int_{-\infty}^\infty j_{n0}(z) j_{E0}^*(z') dz}{(E_n - E_0)[\hbar^2 \omega^2 - (E_n - E_0)^2]} \right. \\ \left. + \int_0^\infty \frac{P_{E'0} \int_{-\infty}^\infty j_{E'0}(z) j_{E0}^*(z') dz}{(E' - E_0)[\hbar^2 \omega^2 - (E' - E_0)^2]} dE' \right\}. \quad (2) \end{aligned}$$

Здесь $P_{E0}^0 = (ie/\omega) \int j_{E0}(z) F_0 dz$ — стандартный матричный элемент в однородном поле, пропорциональный матричному элементу импульса. Аналогично, путем умножения на $F(z') j_{n0}^*(z)$ и последующего интегрирования, получаем

$$\begin{aligned} P_{n0}^0 = P_{n0} - \frac{8\pi n_s e^2 \hbar^3}{\varepsilon_\infty} \\ \times \left\{ \sum_{m=1}^{N-1} \frac{P_{m0} \int_{-\infty}^\infty j_{m0}(z) j_{n0}^*(z') dz}{(E_m - E_0)[\hbar^2 \omega^2 - (E_m - E_0)^2]} \right. \\ \left. + \int_0^\infty \frac{P_{E0} \int_{-\infty}^\infty j_{E0}(z) j_{n0}^*(z) dz}{(E - E_0)[\hbar^2 \omega^2 - (E - E_0)^2]} dE \right\}. \quad (3) \end{aligned}$$

Исключая P_{n0} из системы (2), (3), получаем интегральное уравнение для матричного элемента P_{E0} , описывающего фотоионизацию КЯ. Когда уравнение решено и P_{E0} найдено, то матричные элементы переходов между дискретными уровнями P_{n0} уже легко находятся из системы линейных уравнений (3). Описанная задача весьма сложна, но с ней удастся справиться для одного частного, но важного случая, описываемого далее в разд. 3.

Как будет показано далее, наиболее важную роль эффекты деполяризации играют в КЯ с параметрами, близкими к резонансным, т. е. при наличии в КЯ связанного или виртуального состояния с энергией, близкой к нулю. Поэтому основное внимание мы уделим этому случаю, тем более что именно такие КЯ используются для создания фотоприемников.

3. Квантовые ямы, близкие к резонансным

Выражение "потенциальная яма $U(z)$ близка к резонансной" означает, что ее можно сделать резонансной при малом изменении глубины и (или) ширины. Иными словами, найдутся такие числа β и γ , мало отличающиеся от единицы, что яма $U_{\text{res}}(z) = \beta U(\gamma z)$ будет резонансной. Введем вспомогательную функцию $\chi(z)$, представляющую собой волновую функцию с нулевой энергией для резонансной ямы $U_{\text{res}}(z)$, подчиненную условию $|\chi| = 1$ при $z \rightarrow \pm\infty$. С ее помощью определим параметр ρ , представляющий собой численную меру близости КЯ к резонансной,

$$\rho = (2\gamma - \beta - 1)m/\hbar^2 \int_{-\infty}^\infty dz |\chi(z)|^2 U_{\text{res}}(z) \quad (4)$$

(множитель при $2\gamma - \beta - 1$ есть величина порядка обратной характерной ширины КЯ). Можно показать, что выбор β и γ неоднозначен (резонанса можно достичь, меняя только ширину, или только глубину КЯ, или то и другое в различных весовых соотношениях), но величина ρ от этого выбора не зависит, являясь однозначной характеристикой данной потенциальной ямы, имеющей смысл волнового вектора мелкого связанного состояния (при $\rho < 0$ оно является виртуальным).

Для КЯ, близких к резонансным, т. е. при малых $|\rho|$, основные уравнения задачи (2), (3) можно заметно упростить, используя тот факт, что в конечной области пространства размера $L \ll |\rho^{-1}|$ волновая функция состояния с близкой к нулю энергией пропорциональна $\chi(z)$: $\psi_E(z) = C_E(\rho)\chi(z)$ при $E > 0$ и $\psi_N(z) = \sqrt{\rho}\chi(z)$ при $E < 0$, где

$$C_E(\rho) = \frac{\sqrt[4]{mE/2}}{\sqrt{\pi\hbar(E + \hbar^2\rho^2/2m)}}. \quad (5)$$

Теперь в волновых функциях, определяющих матричные элементы переходов, зависимость от координаты z и энергии E разделена. Отсюда следует, что

$$\int_{-\infty}^\infty j_{E'0}(z) j_{E0}^*(z) dz = \hbar^2/m^2 C_E(\rho) C_{E'}(\rho) J, \quad (6)$$

$$J = \int_{-\infty}^\infty \left| \psi_0 \frac{d\chi^*}{dz} - \frac{d\psi_0}{dz} \chi^* \right| dz.$$

В результате интегральное уравнение (2) факторизуется и система (2), (3) сводится к системе алгебраических уравнений. Разумеется, формула (6) является приближенной и справедлива лишь при малых значениях $|E|$. Однако для частот света, близких к порогу фотоионизации КЯ, именно эти значения вносят определяющий вклад в интеграл, что и оправдывает наш приближенный подход.

4. Спектр поглощения

Для дальнейших вычислений положим для определенности, что в КЯ имеется лишь одно глубокое связанное состояние, т.е. энергия первого возбужденного уровня близка к нулю. Это означает, что при $\rho < 0$ в системе есть только основной уровень ψ_0 и состояния континуума. Межуровневые переходы с матричными элементами P_{n0} в системе отсутствуют, и мы имеем единственное интегральное уравнение (2) с вырожденным ядром для определения P_{E0} . Оно легко решается и дает

$$P_{E0} = P_{E0}^0 \frac{\rho - i\sqrt{2mE}/\hbar}{\rho - \tilde{n} - i\sqrt{2mE}/\hbar}, \quad (7)$$

где параметр \tilde{n} пропорционален двумерной концентрации носителей n_s :

$$\tilde{n} = \frac{n_s \pi e^2 \hbar^2}{E_0^2 \varepsilon_\infty m}. \quad (8)$$

При $\rho > 0$ в КЯ есть еще один мелкий уровень с волновой функцией $\psi_1 = \sqrt{\rho}\chi$ и связанное с ним второе уравнение (3) для определения P_{10} . Однако расчеты показывают, что и при не слишком больших положительных ρ формула (7) сохраняет справедливость.

В качестве примера рассмотрим два конкретных вида КЯ: модифицированную потенциальную яму Пешля–Теллера $U(z) = -\hbar^2 \alpha^2 \lambda(\lambda + 1) / [2m\hbar^2(\alpha z)]$ и прямоугольную КЯ с шириной b и глубиной U_0 . В первом случае резонансным КЯ отвечает целочисленные значения $\lambda = N$ и $\chi(z) = P_N[\text{th}(\alpha z)]$, где P_N — полином Лежандра. Мы рассматриваем ситуацию $\lambda \simeq 1$. Как нетрудно показать, при этом

$$\rho = (3/2)\alpha(\lambda - 1), \quad (9)$$

$$\tilde{n} = \frac{4n_s}{\alpha^2 a_B}. \quad (10)$$

Здесь $a_B = \varepsilon_\infty \hbar^2 / me^2$. Для прямоугольной КЯ с $\sqrt{2mU_0}b \simeq \pi\hbar$

$$\rho = \frac{\pi^2}{4b} \left(1 - \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mU_0 b^2} \right), \quad (11)$$

$$\tilde{n} = \frac{\pi n_s b^2}{a_B \xi^4} \left[\frac{2\pi^2 - 6\xi^2 + (\pi^2/2 - 2\xi^2)\xi}{1 + \xi/2} \right], \quad (12)$$

$$\xi = \sqrt{2m|E_0|}b/\hbar.$$

Как следует из (5), одноэлектронный матричный элемент P_{E0}^0 имеет полюс при $E = -\hbar^2 \rho^2 / 2m$, определяющий его амплитуду при малых положительных E . Однако в формуле (7) он сокращается и мы получаем, что выражения для P_{E0}^0 и P_{E0} отличаются лишь заменой $\rho \rightarrow \rho - \tilde{n}$.

Перейдем непосредственно к анализу зависимости коэффициента поглощения α от частоты света ω . Прежде

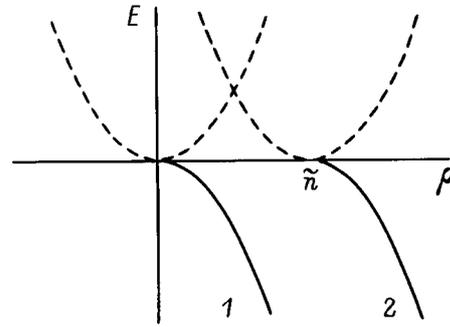


Рис. 1. Схематическое изображение зависимости положения дискретной линии перехода $0 \rightarrow 1$ (сплошная кривая) и максимума в спектре фотоионизации КЯ (штриховая) от параметров КЯ в пренебрежении деполяризацией (1) и при учете деполяризации (2).

всего напомним, что в отсутствие эффектов деполяризации существовал край поглощения с красной границей $\omega_0 = |E_0|/\hbar$, отвечающий переходам к континуум состояний над КЯ, а при $\rho > 0$, когда в КЯ имеется два связанных состояния, — также и дискретный пик при $\hbar\omega = |E_0| - \hbar^2 \rho^2 / 2m$, отвечающий переходам между этими состояниями.

Учет эффектов деполяризации, как уже отмечалось, сводится по существу к замене $\rho \rightarrow \rho - \tilde{n}$ в матричных элементах и спектрах поглощения. Данное обстоятельство является ключевым в понимании роли деполяризации. Как уже отмечалось в [8], положение края поглощения ω_0 от уровня легирования не зависит. Во всем остальном рост концентрации носителей в КЯ оказывает на спектры поглощения такое же влияние, как уменьшение ее глубины или ширины. При $\rho > 0$ по мере увеличения концентрации положение дискретного пика сдвигается по закону $\hbar\omega = |E_0| - \hbar^2(\rho - \tilde{n})^2 / 2m$ и при $\tilde{n} = \rho$ пик, достигнув края поглощения, исчезает (см. рис. 1). Формально это связано с тем, что полюс матричного элемента переходит на нефизический лист комплексной плоскости. Таким образом, для ям мощностью $0 < \rho < \tilde{n}$ мелкое связанное состояние электрона не проявляется в спектрах межподзонного поглощения света.

Край поглощения, соответствующий переходам в континуум, дается следующей формулой:

$$\alpha(\omega) \propto \frac{\sqrt{\hbar\omega + E_0}}{\hbar^2(\rho - \tilde{n})^2 / 2m + \hbar\omega + E_0}. \quad (13)$$

За исключением случая точного равенства $\rho - \tilde{n}$, данное выражение имеет максимум при энергии кванта $\hbar\omega_{\max} = |E_0| + \hbar^2(\rho - \tilde{n})^2 / 2m$, превосходящей $|E_0|$. На рис. 1 показано положение этого максимума в зависимости от параметров КЯ. Заметим, что приведенное выражение является четной функцией $\rho - \tilde{n}$. Поэтому как увеличение, так и уменьшение ширины или глубины КЯ по сравнению с критическим значением одинаковым образом трансформирует форму кривой поглощения (с

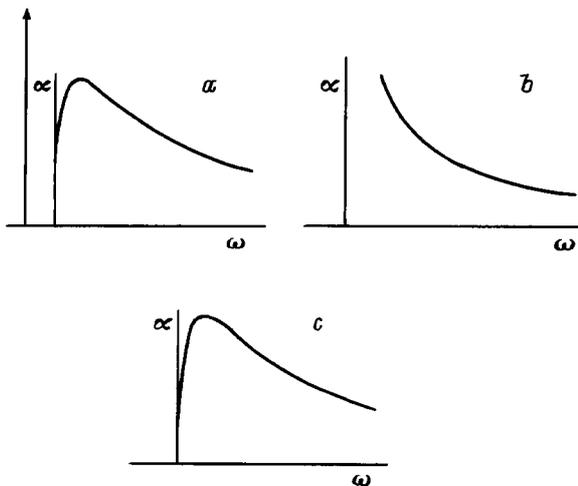


Рис. 2. Эволюция спектра поглощения в КЯ с $\rho > 0$ при увеличении уровня легирования, $a - \tilde{n} < \rho$; $b - n = \rho$; $c - n > \rho$. a — стрелкой отмечено положение линии поглощения для переходов между связанными состояниями.

точностью до сдвига ее края). Случаи положительных и отрицательных $\rho - \tilde{n}$ различаются лишь наличием в первом случае дополнительной дискретной линии поглощения (см. рис. 2).

Легко видеть, что для больших $|\rho|$, т. е. далеко от резонанса, эффекты деполаризации сказываются на спектрах поглощения лишь при весьма высоких концентрациях n_s . Это оправдывает наше повышенное внимание к "почти резонансным" КЯ, где, как уже отмечалось ранее (в тот момент бездоказательно), эффекты деполаризации наиболее существенны.

Аналогичным образом, может быть рассмотрена резонансная КЯ, где близка к нулю энергия не первого, а одного из последующих возбужденных уровней. Реальный расчет будет сложен, поскольку система (2), (3) сведется к алгебраическому уравнению не второго, а более высокого порядка.

5. Заключение

В работе рассмотрено влияние эффектов деполаризации на межподзонное поглощение в КЯ. Получена система уравнений для определения соответствующих матричных элементов. Для наиболее интересного и практически важного случая КЯ, близких к резонансным, получено аналитическое выражение для спектра поглощения. При наличии в КЯ мелкого связанного состояния линия поглощения, обусловленная переходом на такое состояние, сдвигается с ростом концентрации носителей в сторону больших частот и в конце концов исчезает, достигнув порога оптической ионизации КЯ. Само значение порога от концентрации не зависит. Что касается формы спектра фотоионизации, то деполаризационные эффекты оказывают на него такое же влияние, как уменьшение

глубины или ширины КЯ. С практической точки зрения это означает, что если мы хотим создать фотодетектор с максимально большим коэффициентом поглощения на основе КЯ, то последние должны быть более глубокими или широкими (на величину, определяемую уровнем легирования), чем показывает расчет в одноэлектронной модели.

Следует еще раз подчеркнуть, что при $0 < \rho < \tilde{n}$ внутрizonные оптические переходы на мелкое возбужденное состояние не наблюдается. Тем не менее состояние это реально существует и может быть обнаружено в других экспериментах, например, по рамановскому рассеянию или межзонному оптическому поглощению.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 96-02-17961) и Министерства науки РФ по программе "Физика твердотельных наноструктур" (проект 1-081/4).

Список литературы

- [1] B.F. Levine. J. Appl. Phys., **74**, R1 (1993).
- [2] А.Я. Шик. ФТП, **20**, 1598 (1986).
- [3] K.W. Goosen, S.A. Lyon. J. Appl. Phys., **63**, 5149 (1988).
- [4] V.D. Shadrin, F.L. Serzhenko. Onfr. Phys., **32**, 345 (1992).
- [5] H.C. Liu. J. Appl. Phys., **73**, 3062 (1993).
- [6] P. Man, D.S. Pan. Appl. Phys. Lett., **64**, 321 (1994).
- [7] Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. *Электронные свойства двумерных систем* (М., Мир, 1985).
- [8] А.Я. Шик. Письма ЖТФ, **15**, 40 (1989).
- [9] M. Zaluzny. Sol. St. Commun., **79**, 1013 (1991).
- [10] F.L. Serzhenko, N.F. Johnson. Appl. Phys. Lett., **63**, 3467 (1993).
- [11] А.Г. Петров, А.Я. Шик. *Тез. докл. II Рос. конф. по физике полупроводн.* (Зеленогорск, 1996) т. II, с. 185.
- [12] D.A. Dahl, L.J. Sham. Phys. Rev. B, **16**, 651 (1977).

Редактор Л.В. Шаронова

Depolarization effects and quantum well photoionization

A.G. Petrov, A. Shik

A.F. Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St-Petersburg Russia

Abstract The influence of depolarization effects on the inter-subband optical absorption spectra in quantum wells has been investigated theoretically. In the general case, corresponding matrix elements are found from a system of integral equations. For a well with a low-energy bound or quasi-bound state, the problem becomes simpler and reduces to a system of algebraic equations allowing to find matrix elements explicitly. The absorption spectrum has been shown to coincide with the one obtained for a well with smaller depth or width ignoring depolarization. In particular, for wells with a shallow bound state, with the increase of doping level, the absorption peak caused by transitions into this state reaches the photoionization threshold and disappears.