

Расчет состояний мелких доноров в квантовых ямах в магнитном поле методом разложения по плоским волнам

© В.Я. Алешкин[¶], Л.В. Гавриленко

Институт физики микроструктур Российской академии наук,
603950 Нижний Новгород, Россия

(Получена 1 июня 2004 г. Принята к печати 14 июня 2004 г.)

Предложен невариационный метод расчета состояний мелких доноров в квантовых ямах в магнитном поле, применимый в широком диапазоне магнитных полей, начиная с нуля. В основе метода лежит разложение волновой функции электрона по базису собственных функций гамильтониана, описывающего прямоугольную квантовую яму. Результаты, полученные предлагаемым методом, сравниваются с экспериментальными данными и результатами расчетов другими теоретическими методами. Из сравнения видно, что предлагаемый метод более точно описывает наблюдаемый спектр состояний мелких доноров в квантовых ямах в магнитном поле по сравнению с методами, использованными в работе R. Chen и др.

1. Введение

Результаты экспериментальных исследований состояний мелких примесей в гетероструктурах с квантовыми ямами в магнитных полях приводятся уже достаточно давно. Для объяснения полученных данных применяются как вариационные, так и невариационные теоретические методы [1,2]. Хотя в последнее время с помощью вариационных расчетов описывают даже возбужденные состояния примеси, вплоть до состояний $4p_{\pm}$ [1], но для вычисления волновых функций таких состояний необходимо использовать пробные функции с большим числом вариационных параметров. Что касается невариационных методов, их точность сильно зависит от выбора базиса, по которому ведется разложение волновой функции. Например, если выбрать в качестве базисных функций собственные функции электрона в магнитном поле [2], то в слабых магнитных полях потребуются учитывать большое количество членов ряда, чтобы точно описать локализованные примесные состояния. Несмотря на то что эксперимент обычно проводится в достаточно сильных магнитных полях (от 1–2 Тл), полезно знать поведение уровней энергии при уменьшении магнитного поля. Это помогает идентифицировать примесные уровни, выяснить их принадлежность к той или иной группе.

В данной работе представлен метод расчета донорных состояний в гетероструктурах с квантовыми ямами в магнитном поле, приложенном в направлении роста гетероструктуры. В основе метода лежит разложение волновой функции электрона по собственным функциям гамильтониана, описывающего прямоугольную квантовую яму по „плоским волнам“ [3], которые не зависят от магнитного поля. Такой выбор базисных функций позволяет легко описывать основное и возбужденные примесные состояния не только в сильных магнитных полях, но и в слабых — вплоть до нуля.

2. Метод расчета

Без потери общности можем предположить, что исследуемый образец имеет цилиндрическую форму и ось z — нормаль к плоскости квантовой ямы (КЯ). Магнитное поле, направленное вдоль оси роста структуры, не нарушает аксиальной симметрии задачи, следовательно, $L_z = \hbar m$ — проекция момента импульса на ось z — сохраняется. Для определения энергетического спектра волновые функции примесных состояний разлагаются в ряд по собственным функциям гамильтониана в отсутствие магнитного поля и потенциала примеси:

$$\Psi_n^m(\rho, \phi, z) = \frac{\exp im\phi}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n,k} \sqrt{\frac{\pi}{R}} f_n^m(k) \psi_n(z) J_m(k\rho), \quad (1)$$

где ρ, ϕ — полярные координаты, лежащие в плоскости КЯ; k — модуль двумерного волнового вектора; R — радиус цилиндрического образца; $\psi_n(z)$ — волновая функция, описывающая движение электрона по оси z , соответствующая n -й подзоне размерного квантования и удовлетворяющая одномерному уравнению Шредингера без потенциала примеси и магнитного поля; $J_m(k\rho)$ — функция Бесселя m -го порядка. Отметим, что в разложении (1) мы опустили слагаемое, соответствующее вкладу непрерывного спектра. Это допущение справедливо в том случае, если энергия связи описываемых донорных состояний много меньше глубины квантовой ямы и состояния локализованы внутри нее.

В случае изотропного параболического закона дисперсии электронов уравнение Шредингера для частицы в потенциале примесного центра в прямоугольной КЯ и в магнитном поле имеет следующий вид:

$$\hat{H}(\mathbf{r}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + U(z) - \frac{e^2}{\kappa \sqrt{\rho^2 + (z - z_{im})^2}} + V_{\text{chem}} + \frac{e\hbar}{c\mu} H \left(-i \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \frac{e^2 H^2 \rho^2}{8\mu c^2}. \quad (2)$$

Здесь μ — эффективная масса электрона, потенциал $U(z)$ задает энергетический профиль КЯ и зависит от

[¶] E-mail: aleshkin@ipm.sci-nnov.ru

содержания Al в твердом растворе $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [4], κ — диэлектрическая проницаемость, z_{im} — координата донора, H — величина магнитного поля, V_{chem} — потенциал, позволяющий учесть некулоновский вид потенциала донора на малых расстояниях — так называемый химический сдвиг. В качестве короткодействующего потенциала V_{chem} был выбран экранированный кулоновский потенциал

$$V_{\text{chem}} = C \frac{e^2}{\kappa} \frac{\exp(r/l_D)}{r} \quad (3)$$

с длиной экранирования $l_D = 5 \text{ \AA}$; константа C выбиралась так, чтобы энергия ионизации $1s$ -состояния донора соответствовала экспериментальным данным при одном из значений магнитного поля. Подставив волновую функцию в виде (1) в уравнение Шредингера, получаем интегро-дифференциальное уравнение для коэффициентов разложения:

$$\begin{aligned} & -\frac{e^2 H^2}{8\mu c^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial k^2} - \frac{1}{k} \frac{\partial}{\partial k} + \frac{1/4 - m^2}{k^2} \right) f_n^m(k) \\ & + \left(\varepsilon_n - \varepsilon + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} + \frac{\hbar e H m}{2c\mu} \right) f_n^m(k) \\ & - \frac{e^2 k}{2R\kappa} \sum_{n'} \int_0^\infty dk' f_{n'}^m(k') I^m(k, n; k', n') = 0, \quad (4) \end{aligned}$$

где ε — энергия электрона, ε_n — энергия, соответствующая дну n -й подзоны и

$$\begin{aligned} I^m(k, n; k', n') &= \int_0^{2\pi} \cos \theta d\theta \\ &\times \int_{-\infty}^\infty dz \psi_n^*(z) \psi_{n'}(z) \left[\frac{1}{K} \exp(-|z - z_{im}|K) \right. \\ &\left. + \frac{C}{\sqrt{K^2 + 1/l_D^2}} \exp\left(-|z - z_{im}| \sqrt{K^2 + 1/l_D^2}\right) \right], \end{aligned}$$

$$K^2 = k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta.$$

Уравнение (4) решается методом конечных разностей, при этом производные заменяются отношением изменения функции к изменению аргумента, а интеграл по k' заменяется суммой по дискретному набору k' . Каждое слагаемое этой суммы соответствует интегралу по k' в некотором интервале. Если этот интервал мал по сравнению с характерным масштабом изменения подынтегральной функции, то интеграл по каждому из интервалов может быть заменен произведением величины интервала на значение подынтегральной функции в этом интервале. Мы будем использовать эквидистантное разбиение по k' с шагом Δk . В нашем случае существует 2 фактора, оказывающих влияние на радиус локализации волновой функции в плоскости

КЯ, — это потенциал примеси и величина магнитного поля. Поэтому шаг разбиения по k нужно выбирать таким, чтобы он был много меньше обратных величин боровского радиуса r_B и магнитной длины l_H , т.е. $\Delta k \ll \min(1/r_B, 1/l_H)$. Кроме того, понятно, что сумму по k можно оборвать, заменив верхний бесконечный предел суммирования вполне конечной величиной k_{max} , при условии: $k_{\text{max}} \gg \max(1/r_B, 1/l_H)$. Отметим также, что равномерное разбиение по k ($k_i = i\Delta k$), которое мы используем, почти эквивалентно нулевым граничным условиям при $\rho = R = \pi/\Delta k$. Полная эквивалентность была бы, если бы в качестве точек по k выбрать корни функции Бесселя $J_m(kR)$.

Решение интегро-дифференциального уравнения (4) сводится к нахождению собственных значений и собственных векторов матрицы A^m размерности $n_{\text{max}}N \times n_{\text{max}}N$, где n_{max} — число подзон размерного квантования в КЯ и $N = k_{\text{max}}/\Delta k$:

$$\begin{aligned} A_{n,i;n'j}^m &= \left[-\frac{e^2 H}{8\mu c^2} \left(\frac{\delta_{j,i+1} + \delta_{j,i-1} - 2\delta_{j,i}}{\Delta k^2} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\delta_{j,i+1} - \delta_{j,i-1}}{2i\Delta k^2} + \frac{1 - m^2}{i^2 \Delta k^2} \right) \delta_{n,n'} \right] \\ &+ \left[\left(\varepsilon_n + \frac{\hbar^2 \Delta k^2 i^2}{2\mu} + \frac{\hbar e H m}{2c\mu} \right) \delta_{i,j} \delta_{n,n'} \right] \\ &+ \frac{e^2 i (\Delta k)^2}{\pi \kappa} I^m(i\Delta k, n; j\Delta k, n'). \quad (5) \end{aligned}$$

Однако при $i = j$ элементы матрицы A^m сингулярны. Чтобы избежать этой трудности заметим, что эта особенность является интегрируемой по k . Поэтому, следуя работе [3], мы введем в этом случае усредненное значение \bar{A}^m :

$$\bar{A}_{n,i;n',i}^m = \frac{1}{\Delta k} \int_{k_j - \Delta k/2}^{k_j + \Delta k/2} A_{n,i;n',j}^m dk_j.$$

3. Результаты и их обсуждение

Для изучения точности метода были проведены расчеты спектра примесных состояний и энергий переходов $1s \rightarrow np_{\pm}$ ($n = 2, 3$) для мелких доноров в КЯ в магнитном поле. При этом параметры гетероструктур были выбраны такими же, как в работах [1,2], содержащих экспериментальные результаты. Донор находился в центре КЯ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ шириной $d_{\text{QW}} = 125$ или 210 \AA . В 1-й гетероструктуре квантовая яма содержит 3 подзоны размерного квантования, во 2-й — 5. Если энергия, соответствующая дну подзоны, значительно превосходит энергию ионизации примеси, то такая подзона будет слабо влиять на формирование примесных состояний. Поэтому мы включили в рассмотрение только 3 подзоны размерного квантования для обоих типов гетероструктур. Для обеспечения достаточной точности вычислений

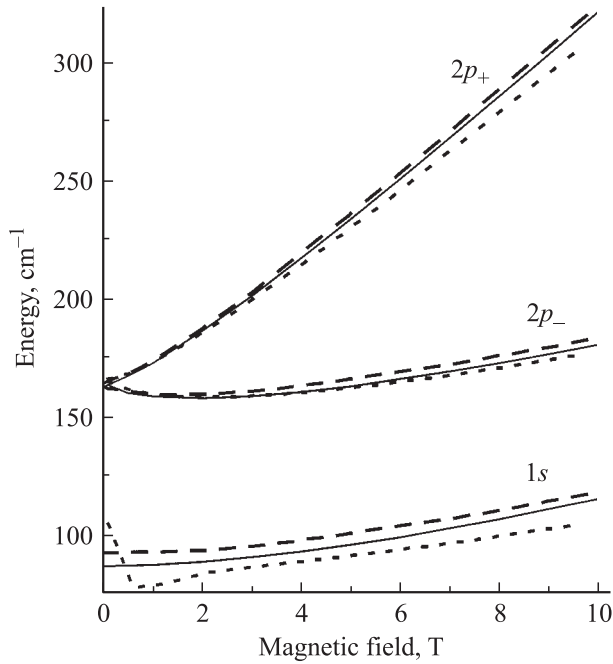


Рис. 1. Энергии уровней $1s$ и $2p_{\pm}$ для донора в центре квантовой ямы $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ шириной $d_{\text{QW}} = 125 \text{ \AA}$ в зависимости от магнитного поля. Сплошные линии — предлагаемый метод расчета, штриховые — вариационный метод [1], пунктирные — невариационный метод [2].

было выбрано разбиение по 1000 точек в k -пространстве в каждой подзоне. Эффективная масса электрона полагалась равной $\mu = 0.067m_0$, диэлектрическая проницаемость материала $\kappa = 12.9$.

На рис. 1 результаты наших расчетов сопоставляются с результатами, полученными вариационным методом в работе [1] и невариационным методом, но с другим выбором базиса, по которому велось разложение волновой функции, и эффективной массой электрона $\mu = 0.069m_0$ [2]. Видно, что невариационные методы дают более низкие значения энергии состояний, чем вариационный расчет. Как известно, вариационный расчет дает завышенные значения энергии уровней. Кроме того, метод, предложенный в работе [2], плохо описывает $1s$ -состояние в магнитных полях ниже 1 Тл.

На рис. 2 и 3 результаты расчета сопоставляются с экспериментальными данными, полученными при измерении спектров поглощения на двух образцах $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ с различной шириной квантовых ям [1]. В спектрах примесного поглощения в магнитных полях наблюдаются оптические переходы, соответствующие правилу отбора $\Delta m = \pm 1$ ($1s \rightarrow 2p_{-}$, $1s \rightarrow 2p_{+}$, $1s \rightarrow 3p_{-}$, $1s \rightarrow 3p_{+}$ и т.д.). Как видно из рис. 2, 3, развитый в настоящей работе метод дает результаты, хорошо согласующиеся с экспериментальными значениями энергий переходов во всем диапазоне магнитных полей.

Для $1s$ -состояний электрона учитывался химический сдвиг, величина которого составила около 1 мэВ. Как видно из рис. 4, с ростом магнитного поля химиче-

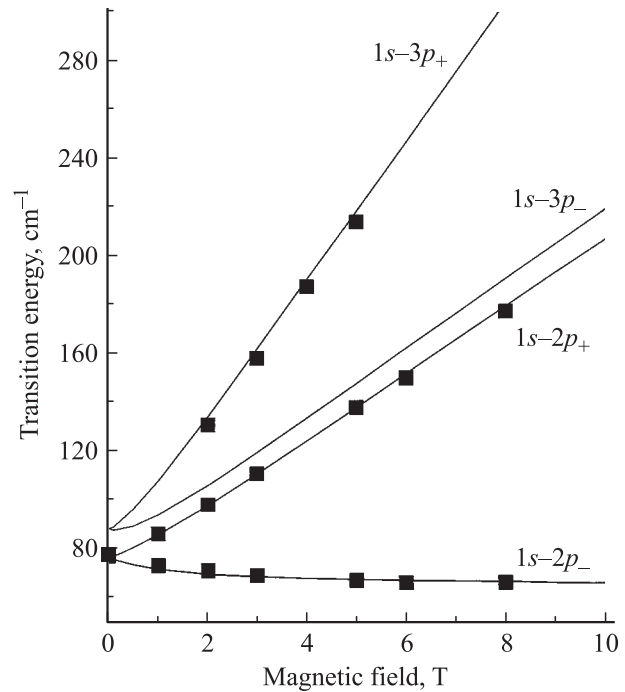


Рис. 2. Зависимости энергии оптических переходов $1s \rightarrow np_{\pm}$ ($n = 2, 3$) от величины магнитного поля для гетероструктуры с квантовой ямой $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ шириной $d_{\text{QW}} = 125 \text{ \AA}$. Точками обозначены экспериментальные данные, линиями — результаты расчетов.

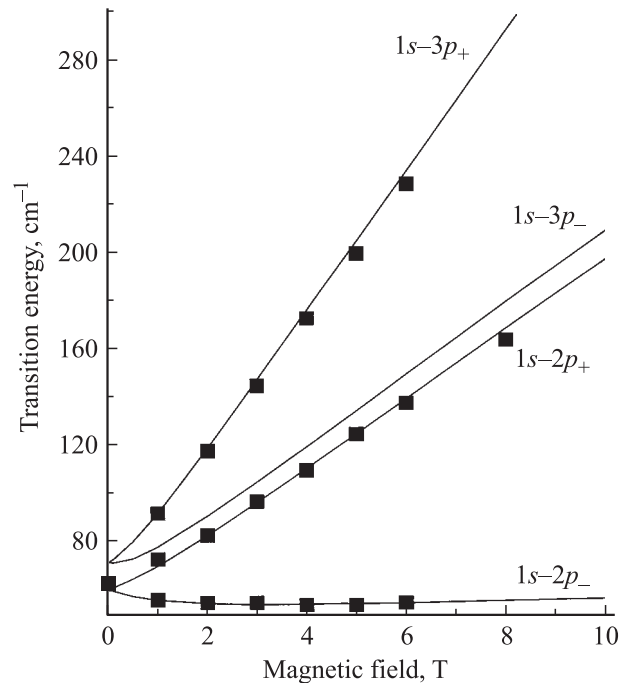


Рис. 3. То же, что и на рис. 2, но для образца с квантовой ямой шириной $d_{\text{QW}} = 210 \text{ \AA}$.

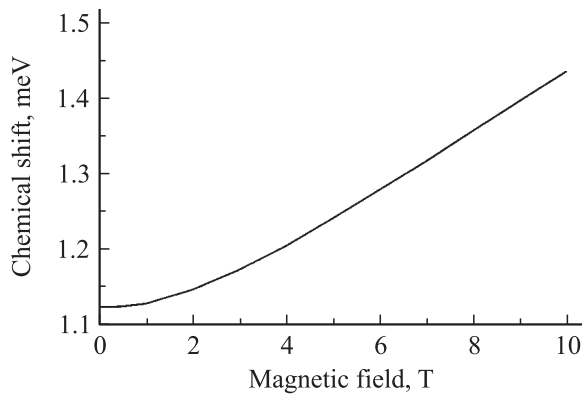


Рис. 4. Зависимость величины химического сдвига для $1s$ -состояния примеси в КЯ от магнитного поля.

ский сдвиг увеличивается. Это происходит потому, что при увеличении магнитного поля волновая функция электрона становится все более локализованной вблизи примеси.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 04-02-17178), МНТЦ (№ 2293), гранта УР.01.01.057, Министерства промышленности, науки и технологий (контракты № 40.072.1.1.1173 и № 40.031.1.1.1187).

Список литературы

- [1] R. Chen, J.P. Cheng, D.L. Lin, B.D. McCombe, T.F. Georg. *J. Phys.: Condens Mater*, **7**, 2577 (1995).
- [2] В.Я. Алешкин, Д.Б. Векслер, В.И. Гавриленко. *Матер. совец. „Наноботоника-2000“* (Н.Новгород, изд-во ИФМ РАН, 2000) с. 88.
- [3] J.P. Loehr, J. Singh. *Phys. Rev. B*, **41**, 3695 (1990).
- [4] E.H. Li. *Physica E*, **5**, 215 (2000).

Редактор Т.А. Полянская

Method for shallow donor states calculation in quantum well in magnetic fields

V.Ya. Aleshkin, L.V. Gavrilenko

Institute for Physics of Microstructures,
Russian Academy of Sciences
603950 Nizhny Novgorod, Russia

Abstract A method for shallow donor states calculation in quantum well heterostructures in magnetic fields is suggested. The method is applicable for a wide range of the magnetic field values starting from zero. The method is based on the electron wave function expansion in terms of eigenfunctions of the Hamiltonian describing a rectangular quantum well. The calculated energies of the electron transitions between the shallow donor levels in quantum well structures are in good agreement with experimental results available.