

Роль флуктуаций потенциала в энергетической структуре квантовых ям GaAs/AlGaAs с A^+ -центрами

© П.В. Петров, Ю.Л. Иванов[¶], В.С. Михрин, А.Е. Жуков

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

(Получена 19 декабря 2007 г. Принята к печати 29 декабря 2007 г.)

Проанализирована трансформация спектров фотолюминесценции, связанной с A^+ -центрами в квантовых ямах GaAs/AlGaAs при изменении степени накачки и температуры. Показано, что в энергетической структуре системы квантовых ям GaAs/AlGaAs с A^+ -центрами существенную роль играют флуктуации электростатического потенциала, которые приводят к перераспределению заряда в пространстве и образованию свободных дырок.

PACS: 68.65.Fg, 73.21.Fg

1. Введение

В исследованиях энергетических, транспортных и оптических свойств квантовых ям GaAs/AlGaAs с A^+ -центрами, проводимых на протяжении последних лет (см., например, [1]), роль флуктуаций потенциала в явном виде практически не учитывалась. Вместе с тем структура квантовых ям GaAs/AlGaAs с A^+ -центрами представляет собой аналог сильно компенсированного полупроводника [2]. Действительно, для того чтобы получить равновесные A^+ -центры, акцепторами легируются одновременно и ямы, и барьеры. Тогда при низких температурах дырки с барьерных акцепторов переходят в ямы и локализуются на нейтральных акцепторах в ямах. Среднее расстояние между примесями в подобных структурах сравнимо с расстоянием между центром ямы и слоем барьерных акцепторов. Вследствие этого образуется сильно флуктуирующий кулоновский потенциал, обусловленный положительно заряженными A^+ -центрами в ямах и отрицательно заряженными ионизированными акцепторами в барьерах. В данной работе для оценки влияния флуктуаций потенциала на энергетическую структуру квантовых ям исследовались зависимости формы спектров фотолюминесценции от интенсивности накачки и температуры. Также было проведено численное моделирование плотности состояний в примесной зоне A^+ -центров с помощью простой модели, учитывающей кулоновское взаимодействие заряженных примесей.

2. Эксперимент

Структура с квантовыми ямами GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As была изготовлена методом молекулярно-пучковой эпитаксии в кристаллографическом направлении роста (100). Ширина квантовых ям равнялась 18 нм. В центрах ям структуры располагались δ -слои шириной 3 нм, легированные бериллием с концентрацией $5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$.

В барьерах, с каждой стороны от ямы, были расположены δ -слои, отстоящие от края ямы на 7 нм, при этом сумма поверхностных концентраций легирования в барьерных слоях с обеих сторон ямы была равна поверхностной концентрации легирования в яме. Ширина барьеров составляла 30 нм. Структура состояла из десяти квантовых ям, отделенных от поверхности образца спейсером из Al_{0.35}Ga_{0.65}As шириной 200 нм. Поверхность образца была защищена слоем GaAs шириной 2 нм. Спектры фотолюминесценции снимались через волновод с образца в гелиевом криостате: либо погруженного непосредственно в жидкий гелий, либо находящегося в парах над поверхностью жидкого гелия. Температура образца контролировалась термосопротивлением с точностью 10%. Для накачки фотолюминесценции использовался полупроводниковый лазер Cube-660 с регулируемой от 0 до 61 мВт мощностью излучения, стабилизированной во всем диапазоне с точностью до 1%. Длина волны света накачки равнялась 660 нм, что обеспечивало подбарьерное прохождение излучения и его максимальное поглощение в ямах. Спектры фотолюминесценции измерялись с помощью дифракционного спектрометра ДФС-12. Для регистрации излучения использовался охлаждаемый фотоэлектронный умножитель ФЭУ-62 в режиме счета фотонов. Динамический диапазон регистрирующей системы, равный 10^4 , позволял измерять спектры при интенсивностях излучения, отличающихся на 2 порядка.

На рис. 1 в логарифмическом масштабе приведены спектры фотолюминесценции, снятые при интенсивностях накачки от 0.8 до 61 мВт при температуре 4.2 К. В спектре доминируют три линии. Линия фотолюминесценции с энергией 1.5252 эВ соответствует коллективному состоянию в A^+ -зоне, природа которого окончательно не установлена. В работе [3] было высказано предположение о том, что таким коллективным состоянием являются молекулярные состояния A^+ -центров. Далее в данной работе эта линия не обсуждается.

Линия наибольшей интенсивности с энергией 1.5274 эВ соответствует излучательной рекомбинации электрона со дна зоны проводимости и дырки основного

[¶] E-mail: yuri.ivanov@mail.ioffe.ru

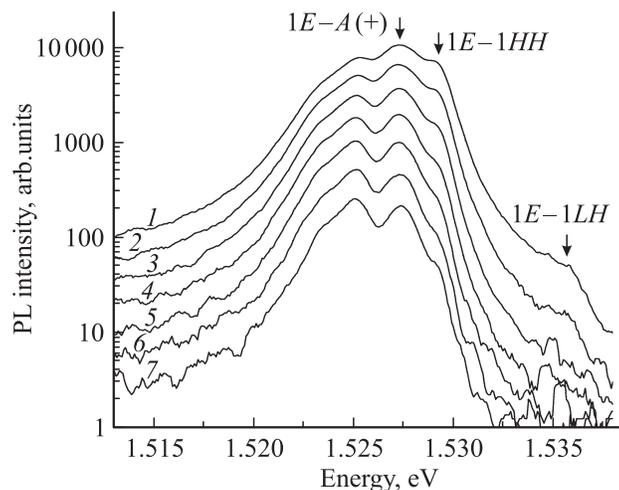


Рис. 1. Спектры фотолюминесценции, снятые при температуре 4.2 К. Интенсивность накачки, мВт: 1 — 61, 2 — 30.4, 3 — 15, 4 — 7.6, 5 — 3.8, 6 — 1.8, 7 — 0.8.

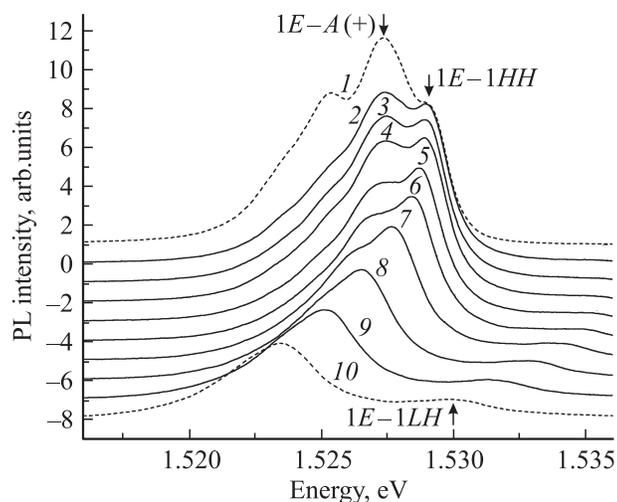


Рис. 2. Спектры фотолюминесценции, снятые при интенсивности накачки 61 мВт. Температура образца, К: 1 — 4.2, 2 — 6, 3 — 8, 4 — 10, 5 — 15, 6 — 20, 7 — 30, 8 — 40, 9 — 50, 10 — 60.

состояния A^+ -центра ($1E-1A^+$). При повышении интенсивности накачки проявляется третья линия с энергией 1.5293 эВ. Эту линию мы сопоставляем с рекомбинацией свободных носителей заряда, находящихся в потенциальных минимумах сильно флуктуирующего потенциала валентной зоны и зоны проводимости (линия $1E-1HH$). При увеличении интенсивности накачки интенсивность данной линии растет по отношению к остальным, что мы связываем с увеличением концентрации неравновесных фотовозбужденных электронов и дырок.

Расчитанные в программе EpitaxyProject энергии оптических переходов для квантовой ямы GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As шириной 18 нм равны 1.536 эВ для основного уровня тяжелой дырки ($1E-1HH$) и 1.542 эВ для следующего за ним уровня легкой дырки ($1E-1LH$).

Линия излучения, сопоставляемая нами с A^+ -состоянием, отстоит от рассчитанной энергии перехода с участием свободных электронов и тяжелой дырки на 8.6 мэВ. Эта величина согласуется с оценкой энергии связи A^+ -центра, полученной из транспортных измерений [4]. Линия же люминесценции $1E-1HH$ из-за наличия сильно флуктуирующего кулоновского потенциала в барьерах оказывается смещенной в длинноволновую область от рассчитанного значения, так как при низких температурах носители заряда концентрируются и рекомбинируют в локальных минимумах зон.

При максимальных уровнях накачки в спектре возникает линия перехода $1E-1LH$, смещенная от линии рекомбинации $1E-1HH$ на 6.5 мэВ (рис. 1). Этот энергетический интервал равен разнице в рассчитанных энергиях переходов с участием основного уровня размерного квантования тяжелых дырок и следующего за ним уровня легких дырок. Такое совпадение подтверждает предположение о том, что данные линии соответствуют рекомбинации свободных дырок в тяжелой и легкой подзонах.

На рис. 2 приведены спектры фотолюминесценции, снятые при различных температурах при максимальной интенсивности накачки. При повышении температуры интенсивность линии, связанной с рекомбинацией A^+ -центров, уменьшается вследствие термического отрыва дырок в зону валентных связей и уменьшения концентрации A^+ -центров.¹ Интенсивность же линии рекомбинации зона-зона остается практически прежней и становится больше линии, связанной с рекомбинацией A^+ -центров. Вместе с тем значительно растет интенсивность люминесценции линии, связанной с подзоной легких дырок, что объясняется как увеличением концентрации свободных носителей, так и термическим забросом дырок в высокоэнергетическую подзону. При высоких температурах линия рекомбинации A^+ -центров пропадает, остается только линия рекомбинации с тяжелыми дырками и в спектре оказываются всего две составляющих. В работе [5] на этом же образце исследовалась линейная поляризация фотолюминесценции этих двух линий, возникающая вследствие одноосной деформации кристалла. Измеренные степени линейной поляризации и величины энергетического расщепления, возникающие с деформацией, однозначно указывают на связь данных линий с рекомбинацией свободных дырок в легкой и тяжелой подзонах, что подтверждает правильность нашей идентификации.

3. Численное моделирование

Для теоретической оценки влияния кулоновских флуктуаций потенциала на энергетическую структуру квантовой ямы было произведено численное моделирова-

¹ Заметим, что интенсивность линии фотолюминесценции, соответствующей коллективному состоянию A^+ -центров, уменьшается с температурой еще быстрее, что соответствует данным работы [3].

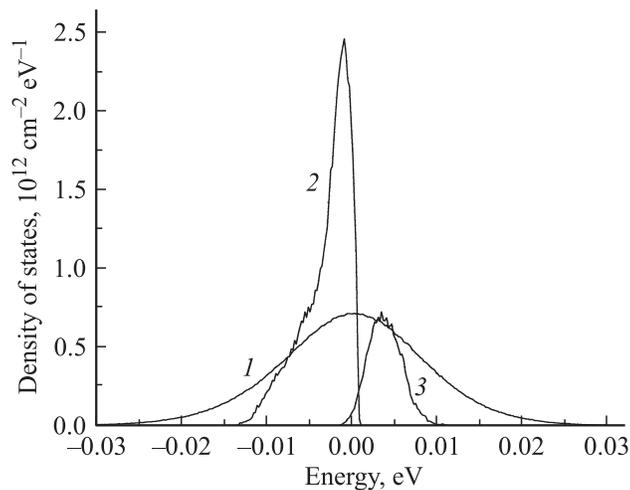


Рис. 3. Плотность энергетических состояний валентной зоны. 1 — плотность состояний A^+ -зоны до учета делокализации, 2 — A^+ -зона после делокализации, 3 — плотность свободных дырок в минимумах потенциала.

ние плотности состояний в A^+ -зоне. Моделирование производилось для следующей простой электростатической модели. Примесные центры случайным образом располагались в двух плоскостях, отстоящих друг от друга на расстоянии $d = W/2 + L$, где $W = 18$ нм — ширина квантовой ямы, а $L = 7$ нм — расстояние от края ямы до слоя барьерных акцепторов. В одной плоскости находились неподвижные отрицательные заряды, соответствующие ионизированным барьерным акцепторам. В другой плоскости, по случайно расположенным нейтральным акцепторам, распределялись положительно заряженные дырки. Далее вычислялся суммарный электростатический потенциал всех зарядов в точке нахождения каждой дырки. Для исключения краевых эффектов при вычислении потенциала использовались циклические граничные условия. Зная значения потенциалов всех локализованных дырок, легко вычислить энергетическую плотность состояний для примесной зоны. Плотность состояния дырок в A^+ -зоне с учетом только кулоновских флуктуаций заряда приведена на рис. 3 (кривая 1). Расчет выполнен для значений поверхностных концентраций акцепторов в ямах и барьерах, равных $1.5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$, что соответствует концентрациям легирования экспериментально исследованного образца.

Флуктуации отрицательного заряда в барьерах приводят к тому, что в отдельных точках пространства минимум потенциала для свободных дырок становится меньше максимума потенциала в A^+ -зоне. Вследствие этого некоторое количество дырок из A^+ -зоны делокализуется и переходит в локальные минимумы потенциала валентной зоны. Данный процесс был продемонстрирован с помощью следующего алгоритма. Вся плоскость, содержащая примесные центры, была разбита на квадраты шириной порядка половины среднего расстояния между центрами. Далее находился квадрат с наимень-

шим электростатическим потенциалом U_{\min} . Если для дырки с максимальным потенциалом U_{\max} в примесной зоне оказывалось, что $U_{\max} > U_{\min} + \delta$, то производился переброс такой дырки в точку с потенциалом U_{\min} . Здесь $\delta = 8.5$ мэВ — оценка для энергии связи A^+ -центра в такой квантовой яме. Далее электростатические потенциалы для всей системы пересчитывались, производился новый переброс, и этот цикл повторялся до тех пор, пока процесс не становился энергетически невыгодным. Получившиеся в результате такого итерационного процесса плотности состояний дырок в A^+ -зоне и зоне валентных связей представлены на рис. 3 кривыми 2 и 3 соответственно.

Первым результатом частичной делокализации дырок с A^+ -центров является экранировка флуктуаций отрицательного заряда в барьерах, что хорошо видно по уменьшению ширины функции плотности состояний. Экранировка флуктуаций приводит к выравниванию потенциального профиля в зоне проводимости. Следовательно, становится возможным сравнивать спектры фотолюминесценции непосредственно с плотностью состояний валентной зоны.

Вторым изменением в плотности состояний является проявление отдельного пика, соответствующего свободным дыркам, локализованным в минимумах потенциала. Между остающимися после делокализации заполненными и незаполненными A^+ -состояниями появляется кулоновская щель, вследствие чего плотность A^+ -состояний на уровне Ферми стремится к нулю. Плотность же делокализованных состояний при приближении к уровню Ферми превышает плотность локализованных, что и приводит к проявлению делокализованных состояний в виде отдельного максимума.

Параметры полученной в результате численного моделирования плотности состояний качественно согласуются с экспериментальными результатами. Отношение амплитуд пиков вычисленных плотностей состояний локализованных и делокализованных дырок хорошо совпадает с соотношением амплитуд соответствующих пиков в спектре фотолюминесценции, снятом при температуре 4.2 К и при минимальной интенсивности накачки, т.е. в условиях, когда концентрация неравновесных носителей мала. Ширина и расстояние между пиками в расчете составляют величины около 4 мэВ, тогда как в эксперименте наблюдаются значения этих величин около 2 мэВ. Количественное расхождение между результатом моделирования и экспериментом объясняется простотой физической модели, в которой свободные дырки рассматриваются как точечные заряды. Для более реалистичного расчета необходимо учитывать квантово-механическую природу зоны валентных связей. Необходимо также принимать во внимание следующее соображение. Наличие флуктуаций приводит к тому, что потенциальные минимумы для дырок и электронов оказываются пространственно разнесены, т.е. в излучательной рекомбинации будут участвовать главным образом электроны и дырки с энергией, близкой к

энергии Ферми. Как следствие, возможны сближение и уменьшение ширины линий фотолюминесценции по сравнению с рассчитанной плотностью состояний.

4. Заключение

В работе исследовано влияние электростатических флуктуаций потенциала на энергетические свойства зон свободных носителей заряда, а также на свойства двумерной примесной A^+ -зоны. Показано, что в результате наличия таких флуктуаций часть дырок из A^+ -зоны переходит в зону валентных связей, а линии фотолюминесценции переходов $1E-1HH$ и $1E-1LH$ смещаются в длинноволновую область. Численно промоделирована функция плотности энергетических состояний валентной зоны с учетом кулоновского потенциала заряженных примесей и частичной делокализации дырок. Полученные в результате моделирования параметры плотности состояний качественно совпадают с экспериментальными данными, что подтверждает правильность выбора физической модели и идентификации линий фотолюминесценции. В результате оптических измерений подтверждена полученная ранее оценка для энергии связи A^+ -центров в квантовых ямах GaAs/AlGaAs.

Авторы выражают благодарность Д. Смирнову (Лицей „Физико-техническая школа“) за выполнение вычислений.

Работа поддержана научными программами Российской академии наук, РФФИ (№ 07-02-00325), президентской программой „Ведущие научные школы“ (НШ 5920.2006.2), программой СПбНЦ, а также грантом МД-4277.2004.2 Президента Российской Федерации.

Список литературы

- [1] N.V. Agrinskaya, Yu.L. Ivánov, P.A. Petrov, V.M. Ustinov. Sol. St. Commun., **126** (7), 369 (2003).
- [2] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. *Электронные свойства легированных полупроводников* (М., Наука, 1979).
- [3] П.В. Петров, Ю.Л. Ива́нов, А.Е. Жуков. ФТП, **41** (7), 850 (2007).
- [4] Н.В. Агринская, Ю.Л. Ива́нов, В.М. Устинов, Д.А. Полоскин. ФТП, **35** (5), 571 (2001).
- [5] Н.С. Аверкиев, Ю.Л. Ива́нов, А.А.Красивичев, П.В. Петров, Н.И. Саблина, В.Е. Седов. ФТП, **42** (3), 322 (2008).

Редактор Л.В. Беляков

Role of potential fluctuations in energy structure of GaAs/AlGaAs quantum wells with A^+ -centers

P.V. Petrov, Yu. L. Ivánov, V.S. Mikhlin, A.E. Zhukov

Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Science,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract Analysis of photoluminescence spectra transformation connected with A^+ centers in QW GaAs/AlGaAs under pumping and temperature changing has been carried out. Fluctuations of electrostatic potential are shown to be important in energy structure of QW, those lead to redistribution of space charge and free holes appearing.