Влияние локализации в квантовой яме на время жизни состояний мелких примесных центров

© Е.Е. Орлова[¶], Р. Harrison^{*}, W.-M. Zheng[†], M.P. Halsall[†]

Институт физики микроструктур Российской академии наук, 603950 Нижний Новгород, Россия * School of Electronic and Electrical Engineering, The University of Leeds, LS2 9JT, UK [†] Department of Physics, UMIST, PO BOX 88, Manchester M60 1QD, UK

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

Представлены результаты теоретических и экспериментальных исследований влияния локализации в квантовой яме на время жизни состояний мелких примесных центров. Переходы между возбужденными примесными состояниями обусловлены взаимодействием с акустическими фононами, волновой вектор которых превышает локализацию волновой функции состояния в пространстве волновых векторов, и, таким образом, определяются асимптотическим поведением волновой функции примесных состояний при больших значениях волновых векторов. Показано, что локализация в квантовой яме приводит к замедлению спадания волновых функций примесных состояний в пространстве волновых векторов и может приводить к экспоненциальному уменьшению времени жизни примесных состояний с уменьшением ширины ямы. Теоретические результаты хорошо согласуются с даными экспериментальных исследований времени жизни акцепторных состояний в структурах GaAs/AlAs:Be.

Интерес к неравновесной заселенности и времени жизни мелких примесных состояний в полупроводниках связан с возможностью получения стимулированного излучения на примесных переходах, которая недавно была реализована экспериментально [1,2]. Полупроводниковые структуры привлекательны с точки зрения создания новых источников стимулированного излучения на примесных переходах, поскольку свойства примесных состояний, неизменные в объемных полупроводниках, можно изменять, варьируя параметры структур [3]. Времена жизни примесных состояний являются основным фактором, определяющим как возможность получения инверсии заселенности, так и порог генерации на примесных переходах. В этой статье мы представили результаты экспериментальных и теоретических исследований времени жизни возбужденных примесных состояний в гетероструктурах с б-легированными квантовыми ямами.

Экспериментальное исследование релаксации электронов с примесных состояний в GaAs:Ве и структурах GaAs/AlAs:Ве проводилось с использованием лазера на свободных электронах (Dutch FEL) [4,5]. Структуры содержали квантовые ямы шириной 20, 15 или 10 нм с δ -легированными слоями в центре ямы (рис. 1). Низкотемпературные (при 4 K) измерения поглощения длинноволнового инфракрасного излучения (ДИК) показали три основные линии переходов 1s-2p для всех образцов. Энергия ионизации и возбуждения возрастает с уменьшением ширины квантовой ямы L в согласии с вариационными расчетами примесных состояний [3]. Динамика релаксации электронов на примесных состояниях изучалась с помощью сдвоенных пикосекундных импульсов — импульса накачки и зондирующего (ритр–ргове).

Было обнаружено быстрое уменьшение времени жизни 2p-состояния акцептора по мере уменьшения L с 360 пс в объемном GaAs до 55 пс в случае квантовых ям 10 нм (рис. 2). Следует отметить, что ширина ям L была много больше радиуса орбит примесных состояний, и энергия состояний изменялась не более чем на 20% во всех исследованных структурах.

Переходы между нижними возбужденными примесными состояниями, разделенными относительно большим энергетическим интервалом, происходят с излучением акустических фононов, волновой вектор которых превышает размер волновой функции в пространстве волновых векторов. Вероятность этих переходов определяется коротковолновой асимптотикой волновых функций примесных состояний [6], которая не может быть полу-



Рис. 1. Энергетическая схема примесных переходов в квантовой яме.

[¶] E-mail: orlova@ipm.sco-nnov.ru



Рис. 2. Зависимость вероятности перехода $2p_0 \rightarrow 1s$ в структурах GaAs/AlAs от ширины квантовой ямы *L*; линия — расчет, экспериментальные данные: *I* — в структурах, *2* — в объемном GaAs.

чена в рамках вариационной процедуры, применяемой обычно для расчета примесных состояний. Вероятность переходов с водороподобных *p*-состояний в объемных полупроводниках уменьшается с увеличением энергии перехода ΔE не медленнее, чем ΔE^{-7} [7]. Энергии примесных переходов увеличиваются с уменьшением ширины ямы [3], однако это не приводит к уменьшению вероятности перехода. Наоборот, наблюдается резкое уменьшение времени жизни примесных состояний. Это связано с изменением коротковолновой асимптотики примесных состояний в квантовых ямах.

Состояние водородоподобного центра в квантовой яме описывается уравнением Шредингера в приближении эффективных масс:

$$\mathbf{T}(\hat{\mathbf{p}})\phi(\mathbf{r}) + U(z)\phi(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{\varepsilon r}\phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r}), \qquad (1)$$

где **T**($\hat{\mathbf{p}}$) — оператор кинетической энергии, ε — диэлектрическая проницаемость; потенциал квантовой ямы $U(z) = -U_0$ при |z| < L/2 и U(z) = 0 при |z| > L/2(см. рис. 1). Для исследования коротковолновой асимптотики удобно использовать представление в пространстве волновых векторов:

$$\mathbf{T}(\hbar\mathbf{k})\varphi(\mathbf{k}) - \frac{LU_0}{2\pi} \int \varphi(k'_z, \mathbf{k}_\perp) \frac{\sin[(k_z - k'_z)L/2]}{(k_z - k'_z)L/2} dk'_z - \frac{e^2}{2\pi^2\varepsilon} \int \frac{\varphi(\mathbf{k}')}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2} d\mathbf{k}' = E\varphi(\mathbf{k}), \qquad (2)$$

где \mathbf{k}_{\perp} — компонента волнового вектора, перпендикулярная оси *z*. Волновая функция в реальном пространстве связана с преобразованием Фурье $\varphi(\mathbf{k})$:

$$\phi(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} \int \varphi(\mathbf{k}) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

В случае больших волновых векторов волновая функция является комбинацией двух компонент:

$$\varphi(\mathbf{k}) = \Phi_{\rm w}(\mathbf{k}) + \Phi_{\rm C}(\mathbf{k}). \tag{3}$$

Вторая составляющая (3)

$$\Phi_{\rm C}(\mathbf{k}) = \frac{e^2}{2\pi^2 \varepsilon \mathbf{T}(\hbar \mathbf{k})} \int \frac{\varphi(\mathbf{k}')}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2} d\mathbf{k}' \tag{4}$$

аналогична функции, полученной в работе [6] для кулоновских центров в объемном материале. Первая компонента (3) содержит потенциал квантовой ямы:

$$\Phi_{\rm w}(\mathbf{k}) = \frac{LU_0}{2\pi \mathbf{T}(\hbar \mathbf{k})} \int \varphi(k'_z, \mathbf{k}_\perp) \frac{\sin[(k_z - k'_z)L/2]}{(k_z - k'_z)L/2} dk'_z.$$
 (5)

Поведение $\Phi_{\rm C}({\bf k})$ при больших k может быть рассмотрено с помощью разложения величины $1/|{\bf k}-{\bf k}'|^2$ в ряд Тейлора по степеням k'. В соответствии с [6] $\Phi_{\rm C}({\bf k})$ спадает при больших волновых векторах как $k^{-(n+4)}$, где n — порядок первого неисчезающего момента $\varphi({\bf k})$.

Чтобы получить асимптотическое поведение $\Phi_{\rm w}(\mathbf{k})$, мы оставляем в выражении (5) первый член в разложении Тейлора $1/|k_z - k'_z| \approx 1/k_z$, предполагая $k'_z \ll k_z$:

$$\Phi_{\rm w}(\mathbf{k}) = \frac{U_0}{\pi \mathbf{T}(\hbar \mathbf{k})k_z} \int \varphi(k'_z, \mathbf{k}_\perp) \sin[(k_z - k'_z)L/2] dk'_z.$$
(6)

Представляя синус в экспоненциальной форме и делая обратное преобразование Фурье $\varphi(k'_z, \mathbf{k}_{\perp})$, получаем

$$\Phi_{\rm w}(\mathbf{k}) = \frac{\mu U_0}{\sqrt{2\pi^3} \mathbf{T}(\hbar \mathbf{k}) k_z} \int \phi(\mathbf{r})|_{z=L/2} \exp(i\mathbf{k}_{\perp}\mathbf{r}_{\perp}) d\mathbf{r}_{\perp},$$
(7)

где $\mu = \sin(k_z L/2)$ для четных волновых функций и $\mu = \cos(k_z L/2)/i$ для нечетных. Поскольку μ быстро осциллирует при $k_z \gg 2/L$ с изменением L, величина $|\mu|^2$ может быть оценена по его среднему значению за период $\overline{|\mu|^2} = 1/2$. Таким образом, первая составляющая волновой функции (3) $\Phi_{\rm w}(k_z) \propto k_z^{-3}$ и спадает медленнее при больших волновых значениях *z*-компоненты волнового вектора, чем вторая составляющая $\Phi_{\rm C}(k_z)$. Чтобы оценить вклад компоненты Φ_w и ее зависимость от ширины ямы, мы предполагаем, что боровский радиус много меньше ширины ямы $(a_{\rm B} \ll L)$ и волновые функции примесных состояний в яме мало отличаются от примесных состояний в объемном полупроводнике. Поскольку последние экспоненциально спадают с расстоянием от центра, интегралы в (7) также экспоненциально уменьшаются с увеличением ширины ямы. В приближении невырожденной изотропной зоны для состояний 1s и 2 p_0 получено

$$\Phi_{\rm w}^{1s}(\mathbf{k}) = Q^{1s} \sin(k_z L/2) F(\mathbf{k}) \exp(-k_{\perp}^2 a_{\rm B} L/4 - L/2a_{\rm B}),$$

$$\Phi_{\rm w}^{2p_0}(\mathbf{k}) = Q^{2p_0} \cos(k_z L/2) LF(\mathbf{k}) \exp(-k_{\perp}^2 a_{\rm B} L/2 - L/4a_{\rm B}),$$

(8)

Физика и техника полупроводников, 2005, том 39, вып. 1

где

$$F(\mathbf{k}) = \frac{U_0 a_{\rm B} L}{(2\pi)^3} \mathbf{T}(\hbar \mathbf{k}) k_z;$$
$$Q^{1s} = (2\pi)^{3/2} \phi_{1s}(\mathbf{r} = 0), \quad Q^{2p_0} = -(2\pi)^{3/2} i \nabla \phi_{2p_0}(\mathbf{r})|_{\mathbf{r}=0}.$$

Более медленная асимптотика волновой фукнции примесных состояний, обусловленная потенциалом квантовой ямы, может приводить к увеличению вероятности переходов с излучением коротковолновых акустических фононов.

Вероятность перехода между состояниями 1 и 2 при спонтанном излучении акустических фононов в приближении изотропного закона дисперсии фононов описывается выражением [8]

$$W_{2\to 1} = \frac{1}{16\pi} \frac{C}{\ell_0} \left(\frac{\Delta E}{mC^2}\right)^3 \int |M_{1,2}^{\mathbf{q}}|^2 d\Omega_q, \qquad (9)$$

где интегрирование производится по углам вектора **q**, $\hbar Cq = \Delta E$, C — скорость звука, m — эффективная масса, $\ell_0 = \pi \hbar^4 \rho_c / 2m^3 E_D^2$ — характерная длина рассеяния на акустических фононах, ρ_c — плотность кристалла, E_D — константа деформационного потенциала. Матричный элемент перехода в представлении волновых векторов

$$M_{1,2}^{\mathbf{q}} = \int \varphi_2^*(\mathbf{k})\varphi_1(\mathbf{k} + \mathbf{q})d\mathbf{k}$$
(10)

определяется при больших **k** областями двух максимумов — вблизи **k** = 0 и **k** = -**q**, где более медленные фунции могут быть разложены в ряд Тейлора. Таким образом, получаем, что интегралы в (10) пропорциональны значениям волновой функции, или ее производной при **k** = **q**. Компонента матричного элемента, соответствующая Φ_C , пропорциональна $q^{-(4+n_1+n_2)}$, где $n_{1,2}$ — порядки первых неисчезающих моментов волновой функции, в то время как вклад Φ_w пропорционален $q^{-(3+n)}$, где n — наименьшее из n_1 и n_2 . Для переходов между состояниями *s*- и *p*-типа

$$M_{s,p}^{\mathbf{q}} = Q^p \nabla_q \varphi_s(\mathbf{q}) + \varphi_p^*(-\mathbf{q}) Q^s.$$
(11)

Предполагая, что Φ_w дает основной вклад в волновую функцию при $\mathbf{k} = \mathbf{q}$, и учитывая, что $L \gg a_B$, q^{-1} , матричный элемент перехода $2p_0 \rightarrow 1s$ получаем в виде

$$M_{1s,2p_0}^{\mathbf{q}} = \frac{Q^{1s}Q^{2p_0}U_0L^2a_{\rm B}\cos(q_z L/2)}{(2\pi)^3 \mathbf{T}(\hbar \mathbf{q})q_z} \times \exp(-q_{\perp}^2 La_{\rm B}/2)\exp(-L/4a_{\rm B}), \qquad (12)$$

вероятность перехода между состояниями

$$M_{1s \to 2p_0} = \frac{(Q^{1s}Q^{2p_0}U_0)^2 a_{\rm B}L^3}{2^8 \pi^6 \ell_0 m C^2 \hbar q^5} \exp(-L/2a_{\rm B}).$$
(13)

Таким образом, вероятность перехода растет экспоненциально с уменьшением ширины ямы. Сравнивая (13) с результатами [6], видим, что коротковолновая асимптотика вероятности примесного перехода с излучением акустических фононов определяется потенциалом квантовой ямы при выполнении следующего условия:

$$\left(\frac{U_0}{e^2/\varepsilon a_{\rm B}}\right)^2 q^2 L^3 a_{\rm B}^{-1} e^{-L/2a_{\rm B}} \gg 3\pi^2 2^6.$$
(14)

Типичная глубина квантовой ямы U_0 много больше энергии ионизации $E_i \simeq e^2/2\varepsilon a_{\rm B}$ (в структурах *p*-GaAs/AlAs $U_0 = 460$ мэВ, а $E_i = 28-35$ мэВ). Волновые вектора фононов, соответствующих примесным переходам, $q \gg 1/L$ (энергия ΔE , соответствующая q = 1/L, меньше 0.4 мэВ в исследованных структурах). Таким образом, условие (14) выполняется в широком диапазоне $L \gg 2a_{\rm B}$.

В соответствии с (11) $\Phi_{\rm w}(q)$ и $\Phi_{\rm C}(q)$ дают аддитивные вклады в матричный элемент при $q \gg 1/a_{\rm B}$. Поскольку компонента матричного элемента, пропорциональная $\Phi_{\rm w}(q)$, осциллирует как $\cos(q_z L/2)$, часть $|M_{1s}^{\bf q}|_{2n_0}^2$, содержащая произведение $\Phi_{\rm w}(q)$ и $\Phi_{\rm C}(q)$, исчезает при усреднении по периоду осцилляций $4\pi/q \ll L$. Таким образом, вклады в вероятность перехода, содержащие $\Phi_{\rm w}(q)$ и $\Phi_{\rm C}(q)$, аддитивны. Результаты расчета вероятности перехода $2p_0 \rightarrow 1s$ от ширины ямы в структурах GaAs/AlAs представлены на рис. 2 вместе с экспериментальными данными. Параметры, использованные в вычислениях: $a_{\rm B} = 16$ Å, $U_0 = 460$ мэВ, $m = 0.51m_0$, $C = 4.8 \cdot 10^5$ см/с, $\varepsilon = 12.9$. Величина $\ell_0 = 5.2 \cdot 10^{-4}$ см получена из данных измерений подвижности дырок в GaAs [9]; $\Delta E = 16 \text{ мэВ}$ — энергия перехода с первого возбужденного состояния на отщепленное основное состояние, которая определяет наблюдаемые времена релаксации — изменяется мало в исследуемых структурах [10,11]. Согласие результатов расчета и экспериментальных данных можно считать хорошим.

Таким образом, экспериментально обнаружено и теоретически обосновано явление уменьшения времени жизни примесных состояний в квантовых ямах. Оно является следствием изменения в квантовых ямах поведения волновой функции примесных состояний при $k \to \infty$, приводящего к усилению взаимодействия с коротковолновыми акустическими фононами.

Работа поддержана Royal Society/Nato Fellowship, грантом РФФИ № 03-02-16586 и грантом EPSRC GR/N65639/01.

Список литературы

- S.G. Pavlov, R.Kh. Zhukavin, E.E. Orlova, V.N. Shastin, A.V. Kirsanov, H.-W. Huebers, K. Auen, H. Riemann. Phys. Rev. Lett., 84, 5220 (2000).
- [2] M.A. Odnoblyudov, I.N. Yassievich, M.S. Kagan, Yu.M. Galperin, K.A. Chao. Phys. Rev. Lett., 83, 644 (1999).

- [3] W.-M. Zhang, M.P. Halsall, P. Harmer, P. Harrison, M.J. Steer. J. Appl. Phys., 92, 6039 (2002).
- [4] W.-M. Zhang, M.P. Halsall, P. Harmer, P. Harrison, J.-P.R. Wells, I.V. Bradley, M.J. Steer. Phys. Status Solidi (b), 235, 54 (20003).
- [5] M.P. Halsall, P. Harrison, J.-P.R. Wells, I.V. Bradley, H. Pellemans. Phys. Rev. B, 63, 155 314 (2001).
- [6] S.V. Meshkov. ΦΤΤ, **21**, 647 (1979).
- [7] G. Ascarelly, S. Rodriquez. Phys. Rev., 124, 1321 (1961).
- [8] V.N. Abakumov, V.I. Perel, I.N. Yassievich. Nonradiative Recombination in Semiconductors (North-Holland, Oxford, 1991).
- [9] D.E. Hill. J. Appl. Phys., 41, 1815 (1970).
- [10] W.T. Masselink, Y.-C. Chang, H. Morkoç. Phys. Rev. B, 32, 5190 (1985).
- [11] A.A. Reeder, J.-M. Mercy, B.D. McCombe. IEEE J. Quant. Electron., 24, 1690 (1988).

Редактор Т.А. Полянская

Influence of localization in the quantum well on shallow impurity states life times

E.E. Orlova, P. Harrison*, W.-M. Zhang[†], M.P. Halsall[†]

Institute for Physics of Microstructures, Russian Academy of Sciences, 603950 Nizhny Novgorod, Russia * School of Electronic and Electrical Engineering, The University of Leeds, LS29JT, UK † Department of Physics, UMIST, PO BOX 88, Manchester M60 1QD, UK

Abstract Results of experimental and theoretical investigations of life times of shallow impurity states in quantum wells are presented. Transitions from the lower excited states are assisted by sohrt wavelength phonons and thus are determined by asymptotic behaviour of wave functions at large wave vectors. It is shown that confinement due to the quantum well potential causes slower decay of impurity states wave functions in wave vector space and may lead to exponential decrease of life times of impurity states with quantum well width. Results of calculations are in good agreement with the data of experimental investigations of Be acceptor excited states in GaAs/AlAs QW structures.