

Магнитооптические свойства 1D-структур на основе InSb с примесными центрами и кейновским законом дисперсии

Е.Н. Калинин, А.В. Калинина

Пензенский государственный университет, Пенза

Аннотация: Рассматривается полупроводниковая квантовая проволока (КП) содержащая примесный центр описываемый в рамках водородоподобной модели. Обсуждается возможность использования InSb КП в фотодетекторах инфракрасного оптического излучения. КП моделируется геометрически симметричным цилиндром, на оси которого в произвольной точке расположен примесный центр, с которым связано начало цилиндрической системы координат в которой производятся вычисления. Предполагается, что магнитная длина существенно меньше эффективного боровского радиуса – случай сильного магнитного поля. Такое приближение позволило сделать потенциал примеси эффективно одномерным и получить аналитически точные результаты расчетов. В приближении эффективной массы, в дипольном приближении получено выражение для матричных элементов оптических переходов электрона из основного состояния примеси в размерно-квантованные состояния КП для случая поперечной поляризации света и кейновским законом дисперсии носителей заряда.

Ключевые слова: матричные элементы оптических переходов, метод эффективной массы, квантовая проволока, дипольное приближение, размерно-квантованные состояния.

Введение

Полупроводниковым квантовым проволокам (КП), как объектам пониженной размерности в которых движение электронов ограничено в двух направлениях, на протяжении многих лет уделяется пристальное внимание исследователей. Это связано с интересными оптическими свойствами таких объектов [1, 2] и возможностью создания оптоэлектронных приборов с уникальными характеристиками [3]. Особый интерес представляют КП на основе InSb, как хорошо изученного узкозонного полупроводника типа $A^{III}B^V$ с малой эффективной массой и большими значениями подвижности электронов. Такие свойства InSb обусловили его широкое применение при создании инфракрасных фотодетекторов. В связи с этим определенный интерес представляет исследование спектральных характеристик поглощения света КП на основе InSb содержащей водородоподобную примесь. Как известно, решетка полупроводникового соединения $A^{III}B^V$ имеет структуру

типа алмаза. Зона Бриллюэна для таких решеток представлена на рис. 1 [4], где показаны также основные точки и линии симметрии.

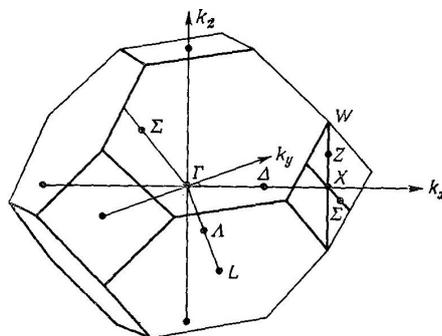


Рис. 1. – Первая зона Бриллюэна для решеток типа алмаза.

Зависимость энергии E_n от k (k - волновой вектор) можно определить решая уравнение Шредингера для соответствующей одноэлектронной задачи. При решении уравнения возникают трудности, которые связаны с проблемой выбора подходящего приближенного метода и достаточно нетривиальных аналитических и численных расчетов. К тому же периодический потенциал кристаллической решетки известен весьма приближенно, и не всегда возможно оценить, как приближенный вид выбранного потенциала отражается на конечном результате расчета, т.е. на зонной структуре. Различными методами можно определить в разных точках зоны Бриллюэна симметрию волновых функций для различных значений k . Затем, используя теорию возмущений, можно качественно оценить, как выглядят энергетические зоны в окрестностях той или иной точки симметрии зоны Бриллюэна. Достаточно подробно Кейном [5] была разработана полуэмпирическая теория зависимости $E_n(k)$ в окрестности точки Γ . Кейн разработал теорию только для InSb , так как в использованном им приближении влияние ниже и выше лежащих зон считалось пренебрежительно малым, что вполне обоснованно, так как из опыта было известно, что экстремумы в обеих зонах приходятся на $k = 0$ и что энергия E_g вблизи Γ существенно меньше всех других энергетических зазоров. Полученные в работе Кейна результаты также хорошо объясняют многие

экспериментальные данные, полученные на других соединениях $A^{III}B^V$. Следует также учитывать, что теория Кейна была разработана для температуры 0 К, и при $T \neq 0$ К величина E_g рассчитанная теоретически не совпадает с экспериментом [6]. В данной работе мы не будем учитывать температурные поправки в виду их малости. Зависимость энергии от k в InSb по направлению [110] по теории Кейна имеет вид изображенный на рис. 2, где пунктиром показано параболическое приближение.



Рис. 2. – Зависимость энергии от k в InSb.

Далее рассмотрим энергетический спектр и волновые функции электрона в полупроводниковой КП на основе InSb в рамках модели Кейна.

Энергетический спектр и волновые функции

КП как и в [7] будем моделировать круглым цилиндром вдоль оси которого направлено однородное магнитное поле, калибровку векторного потенциала которого выбираем в виде $\vec{A} = (-By/2, Bx/2, 0)$. Потенциал КП аппроксимируем симметричным параболическим потенциалом [7]. Все вычисления ведем в цилиндрической системе координат, ось z которой совпадает с осью симметрии цилиндра. В однозонном приближении состояние электрона в КП полупроводника типа $A^{III}B^V$ с кейновским законом дисперсии описывается волновой функцией:

$$\Psi_{n,m,k}(\rho, \varphi, z) = \frac{1}{L\sqrt{\pi}L_z} \frac{\Gamma(n+1)\Gamma(|m|+1)}{\Gamma(|m|+n+1)} \left(\frac{\rho^2}{2a_0^2}\right)^{\frac{|m|}{2}} \exp\left(-\frac{\rho^2}{4a_0^2}\right) L_n^{(|m|)}\left(\frac{\rho^2}{2a_0^2}\right) \exp(ikz), \quad (1)$$

где a_0 – гибридная длина; $L_\alpha^\beta(x)$ – полиномы Лагерра; $\Gamma(x)$ – гамма функция Эйлера; L – радиус КП.

Энергетический спектр определяется выражением:

$$E_{n,m,k} = \sqrt{[\hbar s k]^2 + \left[\frac{\hbar \omega_B m}{2} + \frac{\hbar s}{2a_0}(2n + |m| + 1)\right]^2}, \quad (2)$$

где ω_B – циклотронная частота, s – параметр, характеризующий непараболичность зоны, имеющий размерность скорости ($E_g = 2m^*s^2$, E_g – ширина запрещенной зоны, m^* – эффективная масса электрона).

Далее необходимо определить в КП энергетический спектр связанных состояний водородоподобной примеси. В предположении, что борковский радиус связанного примесного состояния в массивном образце a_0 ($a_0 = \hbar^2 \varepsilon / (m^* z_a e^2)$), где z_a – заряд донорного центра, ε – диэлектрическая проницаемость) больше радиуса проволоки L , примесная задача сводится к решению уравнения Ванье с одномерным потенциалом взаимодействия между заряженными частицами. Обычно этот потенциал определяется усреднением кулоновского по волновым функциям поперечного движения и имеет вид $e^2 / [\varepsilon(a + |z|)]$, где a – величина порядка радиуса проволоки L . Такое отличие потенциала взаимодействия от кулоновского на малых расстояниях между частицами устраняет трудности, связанные с известной неустойчивостью основного состояния одномерного атома водорода. Напомним, что рассматриваемые нами полупроводники типа $A^{III}B^V$ отличаются существенной непараболичностью закона дисперсии носителей заряда.

При таком рассмотрении задачи волновая функция, описывающая основное ($n = 0$) состояние электрона, связанного с донорным центром имеет вид:

$$\Psi_{0,0,0}(\rho, z) = \frac{1}{L\sqrt{\pi}} \left(\frac{2b}{\alpha a_d} \right)^2 \exp\left(-\frac{\rho^2}{4a_0^2}\right) \exp\left(-\frac{b|z|}{\alpha a_d}\right), \quad (3)$$

где $\alpha = e^2/\epsilon\hbar s$, величина $\lambda_s = \alpha a_d = \hbar/m^*s$ представляет собой аналог комптоновской длины волны в случае кейновского полупроводника. Как видно из (3), радиус локализации электрона, связанного на водородоподобном примесном центре в КП в основном состоянии, оказывается меньше по сравнению с λ_s в $b = \sqrt{1 + (\hbar/m^*s a_0)^2}$ раз. Последнее обстоятельство связано с ограниченностью поперечного движения носителей заряда с кейновским законом дисперсии в КП.

Для энергии основного состояния электрона связанного на водородоподобной примеси с учетом асимптотического разложения при $z_d \alpha < 1$, получаем выражение:

$$E_{0,0,0} = -\sqrt{m^*s^4 + \left(\frac{\hbar s}{2a_0}\right)^2}. \quad (4)$$

Далее проведем расчет матричных элементов оптических переходов электрона из основного состояния примесного центра, описываемого в рамках водородоподобной модели, в размерно-квантованные состояния InSb КП в случае поперечной поляризации света.

Расчет матричных элементов

Матричные элементы оптических переходов электрона из основного состояния примесного центра $\Psi_{0,0,0}(\rho, z)$ в состояния $\Psi_{n,m,k}(\rho, \varphi, z)$ КП при поглощении фотона с поперечной поляризацией $\vec{e}_{\lambda t}$ в дипольном приближении записываются в виде [8]:

$$\begin{aligned}
 M_{f,0B}^{(t)} &= \left\langle \Psi_{n,m,k}^* (\rho, \varphi, z) \left| \hat{H}_{int B}^{(t)} \right| \Psi_{0,0,0} (\rho, z) \right\rangle = \\
 &= -i \hbar \lambda_0 \sqrt{\frac{2\pi \hbar^2 \alpha^* I_0}{m^* \omega}} \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} \rho \, d\rho \, d\varphi \, dz \, \Psi_{n,m,k}^* (\rho, \varphi, z) \times \\
 &\times \left(\cos(\theta - \varphi) \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho} \sin(\theta - \varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{i|e|B}{2\hbar} \rho \sin(\varphi - \theta) \right) \Psi_{0,0,0} (\rho, z). \quad (5)
 \end{aligned}$$

Принимая во внимание одноэлектронные состояния в продольном магнитном поле (1) и волновую функцию (3) связанного состояния примесного центра в КП выражение (5) переписывается:

$$\begin{aligned}
 M_{f,0B}^{(t)} &= -i \frac{\hbar \lambda_0}{\pi L^2 \sqrt{L_z}} \sqrt{\frac{2\pi \hbar^2 \alpha^* I_0}{m^* \omega}} \frac{\Gamma(n+1)\Gamma(|m|+1)}{\Gamma(|m|+n+1)} \int_0^{+\infty} d\rho \rho^2 \left(\frac{\rho^2}{2a_0^2} \right)^{\frac{|m|}{2}} \exp\left(-\frac{\rho^2}{2a_0^2}\right) L_n^{|m|} \left(\frac{\rho^2}{2a_0^2} \right) \times \\
 &\times \left(\frac{\rho^2}{2a_0^2} \right) \int_0^{2\pi} d\varphi \exp(-im\varphi) \left[\frac{m^* \omega}{\hbar} \cos(\Theta - \varphi) + \frac{i|e|B}{2\hbar} \sin(\varphi - \Theta) \right] \int_{-\infty}^{+\infty} dz \exp(-ikz) \exp\left(-\frac{b|z|}{a_d}\right). \quad (6)
 \end{aligned}$$

При вычислениях интегралов в (6) по переменной φ [9] появляются правила отбора для магнитного квантового числа m – возможны лишь переходы в состояния КП с $m = \pm 1$.

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \exp(-im\varphi) \left[\frac{m^* \omega}{\hbar} \cos(\Theta - \varphi) + \frac{i|e|B}{2\hbar} \sin(\varphi - \Theta) \right] = 2^{-1} \pi a_d^{-2} \exp(\mp i\Theta) \left[X \delta_{m,1} - \left(\frac{a_d}{a_B} \right)^2 \delta_{m,-1} \right], \quad (7)$$

$$\text{здесь } \delta_{m, \pm 1} \text{ – символ Кронекера: } \delta_{m, \pm 1} = \begin{cases} 1, & \text{если } m = \pm 1, \\ 0, & \text{если } m \neq \pm 1, \end{cases} \quad (8)$$

где « \rightarrow » в $\exp(\mp i\theta)$ относится к $m = +1$, а « \leftarrow » – $m = -1$.

Учитывая (8) интегралы по остальным переменным вычисляются следующим образом [9, 10]:

$$\int_0^{+\infty} d\rho \rho^2 \left(\frac{\rho^2}{2a_0^2} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\rho^2}{2a_0^2}\right) \times L_n^1 \left(\frac{\rho^2}{2a_0^2} \right) = \sqrt{2} a_0^2 \sum_{m_0=0}^n (-1)^{m_0} \binom{n+1}{n-m_0} (m_0+1), \quad (9)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz \exp(-ikz) \exp\left(-\frac{b|z|}{\alpha a_d}\right) = \frac{2b\alpha a_d}{b^2 + (k\alpha a_d)^2} \cdot \quad (10)$$

Подставляя найденные значения интегралов (7), (9) и (10) в (6) и принимая во внимание (8) после небольших преобразований матричные элементы запишутся в виде:

$$M_{f,0B}^{(i)} = i \frac{2^{\frac{1}{2}} \alpha \hbar \lambda_0 a_0^3}{a_d L^2 \sqrt{L_z}} \sqrt{\frac{2\pi \hbar^2 \alpha^*}{m^* \omega}} I_0 \left[\frac{\Gamma(n+1)\Gamma(|m|+1)}{\Gamma(|m|+n+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \times \exp(\mp i\Theta) \times \\ \times \left[X \delta_{m,1} - \left(\frac{a_d}{a_B}\right)^2 \delta_{m,-1} \right] \times \sum_{m_0=0}^n (-1)^{m_0} \binom{n+1}{n-m_0} (m_0+1) \times \frac{b}{b^2 + (k\alpha a_d)^2} \cdot$$

Таким образом, в рамках сделанных в работе приближений, аналитически точно получено выражение для матричных элементов оптических переходов электрона из основного состояния примесного центра, описываемого водородоподобным потенциалом, в размерно-квантованные состояния КП при наличии внешнего магнитного поля. Полученные результаты можно использовать в дальнейшем при расчете спектральных характеристик примесного поглощения КП, в частности коэффициента примесного поглощения света.

Литература

1. Zimmermann R. Excitonic Spectra in Semiconductor Nanostructures // Japanese Journal of Applied Physics. 1995. vol. 34. p. 228-231.
2. Ogawa T., Takagahara T. Interband absorption spectra and Sommerfeld factors of a one-dimensional electron-hole system // Physical Review B. 1991. vol. 43. №. 17. p. 14325-14328.
3. Sakaki H. Scattering Suppression and High-Mobility Effect of Size-Quantized Electrons in Ultrafine Semiconductor Wire Structures // Japanese Journal of Applied Physics. 1980. vol. 19. № 12. p. 735-738.

4. Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников. М.: Наука. 1977. 672 с.
5. Kane E.O. Band structure of indium antimonide // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1957. vol. 1. p. 249-261.
6. Ehrenreich H. Electron scattering in InSb // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1957. vol. 2. № 2. p. 131-149.
7. Калинин Е.Н., Калинина А.В. Эффект фотонного увлечения электронов в полупроводниковой квантовой проволоке с водородоподобными примесными центрами и кейновским законом дисперсии // Инженерный вестник Дона, 2021, № 11. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n11y2021/7262.
8. Кревчик В. Д., Калинин Е. Н. Аномальный квантоворазмерный эффект Зеемана в магнитооптическом спектре 1D-структур с водородоподобными примесными центрами // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Естественные науки. Пенза: ПГУ. 2004. № 5. С. 108-121.
9. Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Физматгиз. 1962. 1100 с.
10. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами. М.: Наука. 1979. 832 с.

References

1. Zimmermann R. Japanese Journal of Applied Physics. 1995. vol. 34. pp. 228-231.
 2. Ogawa T., Takagahara T. Physical Review B. 1991. vol. 43. №. 17. pp. 14325-14328.
 3. Sakaki H. Japanese Journal of Applied Physics. 1980. vol. 19. № 12. pp. 735-738.
-



4. Bonch-Bruevich V.L., Kalashnikov S.G. Fizika poluprovodnikov [Physics of semiconductors]. M.: Nauka. 1977. p. 672.
5. Kane E.O. Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1957. vol. 1. pp. 249-261.
6. Ehrenreich H. Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1957. vol. 2. № 2. pp. 131-149.
7. Kalinin E.N., Kalinina A.V. Inzhenernyj vestnik Dona, 2021, № 11. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n11y2021/7262.
8. Krevchik V. D., Kalinin E. N. Izvestija vysshih uchebnyh zavedenij. Povolzhskij region. Estestvennye nauki. Penza: PGU. 2004. № 5. pp. 108-121.
9. Gradshtejn I.S., Ryzhik I.M. Tablicy integralov, summ, rjadov i proizvedenij [Tables of integrals, sums, series and products]. M.: Fizmatgiz, 1962. p. 1100.
10. Abramovic M., Stigan I. Spravochnik po special'nyh funkcijam s formulami, grafikami i matematicheskimi tablicami [Reference for special functions with formulas, graphs and mathematical tables]. M.: Nauka. 1979. p. 832.