

УДК 621.315.592

ТЕОРИЯ ПРИМЕСНЫХ СОСТОЯНИЙ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МИКРОКРИСТАЛЛАХ

А.С. ГАСПАРЯН, Э.М. КАЗАРЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 18 ноября 1996г.)

Исследованы энергетические состояния водородоподобной примеси, локализованной в центре трехмерного полупроводникового микрокристалла, диспергированного в диэлектрической матрице. Рассмотрена зависимость энергии $1S$, $2P$, $2S$ связанных состояний от размера микрокристалла с учетом конечности потенциальной ямы.

За последнее десятилетие сильно возрос интерес к кулоновским задачам в среде с пониженной размерностью (см., напр., [1-4]). Это было обусловлено развитием микроэлектроники и полупроводниковой техники, позволяющей получать тонкие пленки и проволоки, квазидвумерные гетероструктуры, сверхрешетки, а также поведением водородоподобных систем в сильных магнитных полях.

Авторам работ [5-7] удалось вырастить и исследовать трехмерные микрокристаллы ряда полупроводниковых соединений групп $A^I B^7$ и $A^2 B^6$ в объеме прозрачной диэлектрической матрицы силикатного стекла. Это привело к появлению нового класса "размерных" объектов с пространственным ограничением движения носителей заряда в трех направлениях. Важно, что развитая методика выращивания микрокристаллов позволяет направленно варьировать их размер в широких пределах – от нескольких до десятков тысяч ангстрем, поэтому исследование свойств таких систем в зависимости от радиуса шаров представляет мощный метод изучения параметров полупроводников [8].

В недавней работе [9] был рассмотрен энергетический спектр трехмерной кулоновской задачи в микрокристалле. Однако ее авторы использовали модель бесконечной потенциальной ямы и пренебрегли

поляризацией среды.

В настоящей работе нами исследован спектр водородоподобной примеси в полупроводниковом микрокристалле в приближении равенства диэлектрических постоянных (ДП) двух сред, но с учетом конечности потенциального барьера. Здесь особый интерес представляет область радиусов микрокристалла порядка нескольких десятков ангстрем, когда эффекты кулоновского взаимодействия и размерного квантования, обусловленного ограничением движения носителей заряда, становятся существенными одновременно.

Пусть в среде находится микрокристалл с радиусом R и ДП ϵ , в центре которого помещена примесь с зарядом Ze . На границе раздела микрокристалл-среда имеется конечный потенциальный барьер:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < R, \\ 0, & r > R. \end{cases}$$

Рассмотрим движение электрона в поле примеси. Гамильтониан задачи разделяется на две части:

$$\hat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{\epsilon r} - V_0, \quad \text{для } r < R,$$

$$\hat{H}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m_2^*} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{\epsilon r}, \quad \text{для } r > R,$$

где m_i^* — эффективная масса электрона в данной среде ($i=1,2$).

Следует отметить сферическую симметричность рассматриваемого гамильтониана, вследствие чего движение в поле примеси характеризуется орбитальным моментом количества движения L , а каждое энергетическое состояние $(2L+1)$ -кратно вырождено по проекции момента M .

Применяя обычную в этих случаях процедуру разделения переменных в сферических координатах, уравнение Шредингера для радиальной части волновой функции (в эффективных боровских единицах в микрокристалле) можно представить в следующем виде:

$$R_1''(r) + \frac{2}{r} R_1'(r) + \left(2W + \frac{2Z}{r} - \frac{L(L+1)}{r^2} \right) R_1(r) = 0, \quad r < R, \quad (1)$$

$$R_2''(r) + \frac{2}{r} R_2'(r) + \left(2E\mu + \frac{2Z\mu}{r} - \frac{L(L+1)}{r^2} \right) R_2(r) = 0, \quad r > R, \quad (2)$$

где

$$W = E + V_1, \quad V_1 = \frac{\varepsilon^2 \hbar^2}{m_1^* e^4} V_0, \quad \mu = m_2^* / m_1^*, \quad \hbar = 1.05 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}, \quad (3)$$

а E , $R_1(r)$, $R_2(r)$ — соответственно энергия и радиальные волновые функции электрона внутри и вне микрокристалла.

Далее очевидно, что при $W > 0$ локализация электрона происходит за счет потенциального барьера, а при $W < 0$ — за счет поля примеси. В зависимости от величины W мы рассмотрим три случая.

I. Преобладание размерного квантования ($W \approx 1/R^2$): здесь $W > 0$.

II. Характерный кулоновский спектр ($W \approx W(R)$): здесь $W < 0$.

III. Наиболее интересная стыковая область, где кулоновский фактор и стены ямы вносят равноценные вклады в квантование движения: здесь W меняет свой знак. Она возникает вследствие естественной спектральной ширины дискретных уровней энергии.

Перейдем к количественным исследованиям.

1. $W > 0$

Введем обозначения:

$W = \frac{Z^2}{2\chi^2}$, $\xi = -\frac{Zr}{\chi}$, где $\chi = \chi(n_r, L, \mu, R) > 0$, для случая, соответствующего уравнению (1); n_r — радиальное квантовое число;

$E = -\frac{Z^2 \mu}{2\varphi^2}$, $\xi = \frac{2Z\mu}{\varphi} r$, где $\varphi = \varphi(n_r, L, \mu, R) > 0$, для случая, соответствующего уравнению (2). В новых переменных уравнение (1) примет вид:

$$R_1''(\xi) + \frac{2}{\xi} R_1'(\xi) + \left\{ 1 - \frac{2\chi}{\xi} - \frac{L(L+1)}{\xi^2} \right\} R_1(\xi) = 0. \quad (4)$$

Решением уравнения (4), удовлетворяющим условию конечности при $\xi \rightarrow 0$, является

$$R_1(\xi) = \sum_{k=L+1}^{\infty} A_k(\chi, L) \xi^{k-1}, \quad (5)$$

а коэффициенты степенного ряда удовлетворяют следующему рекуррентному соотношению:

$$(k+L)(k-L-1)A_k(\chi, L) = 2\chi A_{k-1}(\chi, L) - A_{k-2}(\chi, L), \text{ при } k > L+2,$$

$$A_{L+1}(\chi, L) = 1, \quad A_{L+2}(\chi, L) = \frac{\chi}{L+1}.$$

Для уравнения (2) имеем:

$$R_2''(\xi) + \frac{2}{\xi} R_2'(\xi) + \left\{ -\frac{1}{4} + \frac{\varphi}{\xi} - \frac{L(L+1)}{\xi^2} \right\} R_2(\xi) = 0. \quad (6)$$

Решением уравнения (6), удовлетворяющим условию конечности при $\xi \rightarrow \infty$, является

$$R_2(\xi) = e^{-\xi/2} \xi^L G(L+1-\varphi, 2L+2, \xi), \quad (7)$$

где $G(L+1-\varphi, 2L+2, \xi)$ – вырожденная гипергеометрическая функция второго рода (см., напр., [10]).

Отметим, что величины χ и φ связаны соотношением, следующим из их определения:

$$\chi = \left[\frac{2V_1}{Z^2} - \frac{\mu}{\varphi^2} \right]^{-1/2}. \quad (8)$$

Граничные условия в данном случае выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} R_1(r=R) &= R_2(r=R), \quad \frac{1}{m_1^*} R_1'(r=R) = \frac{1}{m_2^*} R_2'(r=R), \\ \mu \frac{R_1'(r=R)}{R_1(r=R)} &= \frac{R_2'(r=R)}{R_2(r=R)}. \end{aligned} \quad (9)$$

Подставляя (5) и (7) в (9), получим:

$$\frac{Z \sum_{k=L+1}^{\infty} A_k(\chi, L)(k-1) \left(-\frac{ZR}{\chi}\right)^{k-2}}{\chi \sum_{k=L+1}^{\infty} A_k(\chi, L) \left(-\frac{ZR}{\chi}\right)^{k-1}} =$$

$$= \frac{2Z(L+1-\varphi)G(L+2-\varphi, 2L+3, \frac{2Z\mu}{\varphi}R)}{\varphi G(L+1-\varphi, 2L+2, \frac{2Z\mu}{\varphi}R)} + \frac{Z}{\varphi} - \frac{L}{R\mu}. \quad (10)$$

Из (8) и (10) определится величина φ , а спектр энергии для случая $W > 0$ найдем из выражения

$$E = -\frac{Z^2 \mu}{2\varphi^2}. \quad (11)$$

2. $W = 0$

Уравнение (1) для данного случая примет вид:

$$R_1''(r) + \frac{2}{r} R_1'(r) - \frac{L(L+1)}{r^2} R_1(r) + \frac{2Z}{r} R_1(r) = 0. \quad (12)$$

С учетом конечности волновой функции при $r \rightarrow 0$, решение уравнения (12) можно представить в виде:

$$R_1(r) = r^{-1/2} J_{(2L+1)}(\sqrt{8Zr}), \quad (13)$$

где $J_{(2L+1)}(\sqrt{8Zr})$ — функция Бесселя первого рода, порядка $(2L+1)$. Для области $r > R$ имеем:

$$\varphi = Z \sqrt{\frac{\mu}{2V_1}}, \quad \xi = \sqrt{8\mu V_1} r. \quad (14)$$

Подставляя (14) в (7), получим волновую функцию вне ямы:

$$R_2(r) = \exp\left\{-\frac{1}{2}\sqrt{8\mu V_1} r\right\} \cdot (\sqrt{8\mu V_1} r)^L \times$$

$$\times G(L+1-Z\sqrt{\frac{\mu}{2V_1}}, 2L+2, \sqrt{8\mu V_1} r). \quad (15)$$

Подставляя волновые функции (13) и (15) в (9), получим условие, из

которого определится радиус ямы для $W = 0$:

$$\frac{(1+1/\mu)L+1}{R} - \sqrt{\frac{2Z}{R}} \cdot \frac{J_{(2L)}(\sqrt{8ZR})}{J_{(2L+1)}(\sqrt{8ZR})} = \sqrt{\frac{8V_1}{\mu}} (L+1 - Z\sqrt{\frac{\mu}{2V_1}}) \times$$

$$\times \frac{G(L+2 - Z\sqrt{\frac{\mu}{2V_1}}, 2L+3, \sqrt{8\mu V_1} R)}{G(L+1 - Z\sqrt{\frac{\mu}{2V_1}}, 2L+2, \sqrt{8\mu V_1} R)} + \sqrt{\frac{2V_1}{\mu}}. \quad (16)$$

3. $W < 0$

Для этого случая введем обозначения

$$W = -\frac{Z^2}{2\lambda^2}, \quad \xi = \frac{2Zr}{\lambda}, \quad (17)$$

где $\lambda = \lambda(n, L, \mu, R) > 0$, а λ и φ связаны соотношением

$$\lambda = \left[\frac{\mu}{\varphi^2} - \frac{2V_1}{Z^2} \right]^{-1/2}. \quad (18)$$

С учетом (17) уравнение (1) примет вид:

$$R_1''(r) + \frac{2}{\xi} R_1'(\xi) + \left\{ -\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{\xi} - \frac{L(L+1)}{\xi^2} \right\} R_1(\xi) = 0. \quad (19)$$

Решение уравнения (19), удовлетворяющее условию конечности при $r \rightarrow 0$, имеет вид:

$$R_1(r) = e^{-\frac{Z}{\lambda}r} \cdot \left(\frac{2Z}{\lambda} r \right)^L \cdot F(L+1-\lambda, 2L+2, \frac{2Z}{\lambda} r), \quad (20)$$

где $F(\alpha, \beta, r)$ – вырожденная гипергеометрическая функция первого рода.

Для области $r > R$ радиальная часть волновой функции имеет вид (7).

Подставляя (7) и (20) в (9), получим:

$$\frac{1}{\lambda} - \frac{(L+1-\lambda)}{\lambda(L+1)} \cdot \frac{F(L+2-\lambda, 2L+3, \frac{2Z}{\lambda} R)}{F(L+1-\lambda, 2L+2, \frac{2Z}{\lambda} R)} =$$

$$= \frac{1}{\varphi} + \frac{2(L+1-\varphi)}{\varphi} \cdot \frac{G(L+2-\varphi, 2L+3, \frac{2Z\mu}{\varphi} R)}{G(L+1-\varphi, 2L+2, \frac{2Z\mu}{\varphi} R)} + \frac{(1-\frac{1}{\mu})L}{ZR}. \quad (21)$$

Из выражений (18) и (21) определим величину ϕ , а спектр энергии для $W < 0$ определится из равенства (11). n , нумерует корни трансцендентных уравнений (10), (16), (21).

Обсуждение результатов

На рис.1 представлена зависимость 1S ($n=1, L=0$), 2S ($n=2, L=0$) и 2P ($n=2, L=1$) энергетических состояний (W) водородоподобной примеси, локализованной в центре микрокристалла CdS, помещенного в NaCl, от его радиуса R . Энергия и радиус представлены в эффективных боровских единицах в CdS: $m_1^* e^4 / \hbar^2 \epsilon^2$ и $\hbar^2 \epsilon / m_1^* e^2$ соответственно. Для данных веществ (CdS/NaCl) $\mu = \frac{m_2^*}{m_1^*} = 14,6$, $V_1 = 55,7$ (см.[11]).

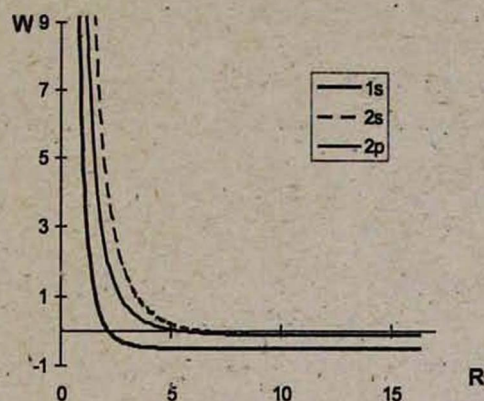


Рис.1. Зависимость 1S ($n=1, L=0$), 2S ($n=2, L=0$) и 2P ($n=2, L=1$) энергетических состояний (W) водородоподобной примеси, локализованной в центре CdS микрокристалла, помещенного в NaCl, от его радиуса R .

При $R > 2,165$ энергия 1S состояния становится отрицательной и стремится к 0.5 согласно теории свободного водородоподобного атома. Энергия 2S состояния отрицательна при $R > 6,529$, а при $R > 16$ становится равной (с точностью до тысячных) значению 0,125, которое соответствует 2S состоянию свободного водородоподобного атома. Аналогичная ситуация наблюдается в случае 2P состояния. Энергия 2P состояния положительна при $R < 5,485$. Эти два энергетических уровня, вырожденные в свободном водородоподобном атоме, расщеплены при $R < 14$.

Когда $R \rightarrow 0$, энергетические уровни поднимаются по закону $W \sim 1/R^2$.

Частица "выпрыгнет" из ямы при $R=0.155$.

В заключение отметим, что учет конечности сферически-симметричной ямы для области радиусов микрокристаллов $1.5 \leq R \leq 6$ приводит к сдвигу энергии связанных состояний вверх на $\sim 16\%$ по сравнению с уровнями энергии в модели бесконечной потенциальной ямы.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Lee, H.N. Spector. J. Vac. Sci. Technol. B., 2, 16 (1984).
2. J.W. Brown, H.N. Spector. Phys. Rev. B., 35, 3009 (1987).
3. S.V. Branis, K.K. Bajaj. Phys. Rev. B., 45, 6273 (1992).
4. G.T. Einevoll. Phys. Rev. B., 45, 3410 (1992).
5. А.И. Екимов, А.А. Онущенко, В.А. Целомский. Физ. и хим. стекла, 6, 511 (1980).
6. Ал.А. Эфрос, А.Л. Эфрос. ФТП, 16, 1209 (1982).
7. А.И. Екимов, А.А. Онущенко. ФТП, 16, 1215 (1982).
8. L. Brus. Appl. Phys. A., 53, 465 (1991).
9. D.S. Chu, C.M. Hsiao, W.N. Mei. Phys. Rev. B., 46, 3898 (1992).
10. А.Ф. Никифоров, В.Б. Уваров. Специальные функции математической физики. М., Наука, 1970.
11. J.S. Pan, H.B. Pan. Phys. Stat. Sol.(b), 148, 129 (1988).

THEORY OF IMPURITY STATES IN SEMICONDUCTING MICROCRYSTALS

A.S.GASPARIAN, E.M.KAZARIAN

Energy states of the hydrogen-like impurity localized in the center of the microcrystal dispersed in a dielectric matrix, are investigated. The effect of the microcrystal sizes on the 1S, 2S, 2P bound states, taking into account the finiteness of the potential well, is considered.

ԽԱՈՆՈՒՐԴԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԻ ՏԵՍՈՒԹՅՈՒՆԸ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ ՄԻԿՐՈԲՅՈՒՐԵԿՐԻՏՏԻՄ

Ա.Ս.ԳԱՍՊԱՐԻԱՆ, Է.Մ.ԿԱԶԱՐԻԱՆ

Ուսումնասիրվում են դիէլեկտրիկ մատրիցում աճեցված եռաչափ կիսահաղորդչային միկրոբյուրեղի կենտրոնում տեղադրված ջրածնամանյան խառնուրդի էներգիական վիճակները: Դիտարկված է 1S, 2S, 2P կապված վիճակների կախվածությունը միկրոբյուրեղի չափսերից, պոտենցիալ խորի վերջավորության հաշվառմամբ: