Известия НАН Армении, Физика, т. 32, №3, с. 130—136 (1997)

УДК 621.315.592

К ТЕОРИИ ПРИМЕСНЫХ СОСТОЯНИЙ В ЭЛЛИПСОИДАЛЬНЫХ МИКРОКРИСТАЛЛАХ

А. С. ГАСПАРЯН, Э. М. КАЗАРЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 18 ноября 1996г.)

Методом квантовой теории возмущений исследованы энергетические состояния и волновые функции водородоподобной примеси, локализованной в геометрическом центре трехмерного полупроводникового микрокристалла эллипсоидальной формы, в приближении бесконечной потенциальной ямы.

В последние годы продолжает расти интерес к полупроводниковым системам с пространственным ограничением движения носителей заряда в трех направлениях, к так называемым микрокристаллам (см., например, [1—3]). Однако во всех работах, относящихся к данным объектам, рассмотрены микрокристаллы сферической формы. С другой стороны, как известно, рост полупроводниковых микрокристаллов в стеклянной матрице осуществляется в процессе диффузионного фазового распада на стадии переконденсации. Очевидно, что получающиеся таким образом полупроводниковые вкрапления не имеют вида идеальных шаров. Ниже нами исследовано влияние несферичности (в частности, эллипсоидальности) микрокристалла на примесные состояния.

Пусть шарообразный микрокристалл (бесконечная потенциальная яма) с диэлектрической постоянной ε и примесью заряда e, расположенной в центре, подвергается малой деформации (без изменения объема), принимая форму слабо вытянутого или сплюснутого эллипсоида вращения с полуосями $a=b$ и c. Тогда уравнение границы эллипсоида

$$\frac{x^2+y^2}{a^2}+\frac{z^2}{c^2}=1 \qquad (1)$$

путем замены переменных

$$x\to ax_0/R,\quad y\to ay_0/R,\quad z\to cz_0/R \qquad (2)$$

превращается в уравнение сферы радиуса R:

$$x_0^2+y_0^2+z_0^2=R^2. \qquad (3)$$

В предположении малого отличия эллипсоида от сферы радиуса $R=(a^2c)^{1/3}$ введем „степень эллипсоидальности“ $\beta(|\beta|\ll 1)$ согласно

$$a\approx R\left(1-\frac{1}{3}\beta+\frac{1}{18}\beta^2\right),\quad c\approx R\left(1+\frac{2}{3}\beta+\frac{2}{9}\beta^2\right). \qquad (4)$$

Тогда в приближении эффективной массы гамильтониан электрона

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta-\frac{\alpha}{(x^2+y^2+z^2)^{1/2}},\quad \text{где } \alpha=\frac{e^2}{\varepsilon},\quad \hbar=1{,}05\cdot10^{-27}\ \text{эрг.с} \tag{5}$$

(M—эффективная масса электрона, энергия отсчитывается от дна ямы), с помощью (2) и (4) нетрудно представить в виде

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}_1+\hat{V}_2, \tag{6}$$

где

$$\hat{H}_0=-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_0-\frac{\alpha}{r},\quad \text{где } r=(x_0^2+y_0^2+z_0^2)^{1/2}, \tag{7}$$

$$\hat{V}_1=-\frac{\hbar^2}{3M}\beta\left(\Delta_0-3\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)-\frac{\alpha}{3}\beta\left(\frac{1}{r}-\frac{3z^2}{r^3}\right), \tag{8}$$

$$\hat{V}_2=\frac{\hbar^2}{9M}\beta^2\left(\Delta_0-3\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)-\frac{2\hbar^2}{9M}\beta^2\Delta_0-\frac{4\alpha}{9}\beta^2\left(\frac{1}{r}-\frac{3z^2}{r^3}\right)+\frac{7\alpha}{18r}\beta^2-\frac{3\alpha z^4}{2r^5}\beta^2. \tag{9}$$

Применим теорию возмущений по параметру β. В силу вида (8) и (9) она применима по схеме для невырожденного случая. В первом порядке изменение уровней энергии электрона по сравнению с уровнями в сферическом микрокристалле:

$$\Delta E_{nLm}=E_{nLm}-E_{nL}^{(0)}=\langle nLm|\hat{V}_1|nLm\rangle \tag{10}$$

(L и m—квантовые числа, характеризующие соответственно величину момента электрона и его проекцию на ось эллипсоида, n нумерует уровни энергии в сферическом микрокристалле при заданном L; последние от числа m не зависят). Оператор $\hat{V}_1$ состоит из суммы zz-компонент неприводимых тензоров 2-го ранга, поэтому следуя [4] с учетом кулоновского взаимодействия и используя теорему вириала, получим:

$$\langle nLm|\hat{V}_1|nLm\rangle=\left(1-\frac{3m^2}{L(L+1)}\right)\langle nL0|\hat{V}_1|nL0\rangle, \tag{11}$$

$$\langle nL0|\hat{V}_{11}|nL0\rangle=0, \tag{12}$$

$$\langle nL0|\hat{V}_{12}|nL0\rangle=2\beta\frac{4L^3+6L^2-1}{(4L^2-1)(2L+3)}E_{nL}^{(0)}, \tag{13}$$

$$\langle nL0|\hat{V}_{13}|nL0=-2\beta\frac{4L^3+6L^2-1}{(4L^2-1)(2L+3)}E_{nL}^{(0)}, \tag{14}$$

где

$$\hat{V}_1=\hat{V}_{11}+\hat{V}_{12}+\hat{V}_{13}, \tag{15}$$

$$\hat{V}_{11}=-\frac{\hbar^2}{3M}\beta\Delta_0-\frac{\alpha}{3r}\beta,\quad \hat{V}_{12}=\frac{\hbar^2\beta}{M}\cdot\frac{\partial^2}{\partial z^2},\quad \hat{V}_{13}=\frac{\alpha\beta z^2}{r^3}. \tag{16}$$

Суммируя полученные результаты, найдем:

$$\langle nLm|V_1|nLm\rangle=0. \tag{17}$$

Таким образом, в первом порядке теории возмущений уровни энергии не изменяются. Заметим, что этот результат также можно было бы получить при непосредственном усреднении тензорных величин, составляющих оператор $\hat{V}_1$ (см.[4]).

Найдем вклад оператора $\hat{V}_1$ во втором порядке. Для этого вычислим матричный элемент $\langle n'L'm'|\hat{V}_1|nLm\rangle$.

Из (8) следуют правила отбора

$m\to m$, $L\to L\pm 1$, $L\to L\pm 2$, $L\to L$, здесь $L\neq 0$. (18)

Далее, имеем:

$$\langle n'L'm'|\hat{V}_1|nLm\rangle=\langle n'L'm|\hat{V}_1|nLm\rangle=(-1)^m\frac{\begin{pmatrix}L'2L\\-m0m\end{pmatrix}}{\begin{pmatrix}L'2L\\000\end{pmatrix}}\langle n'L'0|\hat{V}_1|nL0\rangle, \tag{19}$$

где $\begin{pmatrix}L'2L\\-m0m\end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix}L'2L\\000\end{pmatrix}$—3$j$-символы (см.[4]).

Для переходов $L\to L$ $(n'\neq n)$ аналогично (12), (13) и (14) получим:

$$\langle n'L0|\hat{V}_{11}|nL0\rangle=\frac{\alpha\beta}{3}\int_0^R R_{n'L}R_{nL}r\partial r, \tag{20}$$

$$\langle n'L0|\hat{V}_{12}|nL0\rangle=-2\alpha\beta\left(\frac{(L+1)^2}{4(L+1)^2-1}+\frac{L^2}{4L^2-1}\right)\int_0^R R_{n'L}R_{nL}rdr, \tag{21}$$

$$\langle n'L0|\hat{V}_{13}|nL0\rangle=\alpha\beta\,\frac{2L^2+2L-1}{(2L-1)(2L+3)}\int_0^R R_{n'L}R_{nL}rdr. \tag{22}$$

Суммируя (20), (21), (22) и подставляя в (19), в итоге для $L\to L$ имеем:

$$\langle n'Lm|\hat{V}_1|nLm\rangle=2\alpha\beta\left(\frac{m^2}{L(L+1)}-\frac{1}{3}\right)\frac{L(L+1)}{(2L-1)(2L+3)}\int_0^R R_{n'L}R_{nL}rdr, \tag{23}$$

где R_{nL}—радиальная часть волновой функции электрона в сферическом микрокристалле.

Переходы $L\to L\pm 1$ запрещены законом сохранения четности, поэтому соответствующие матричные элементы равны нулю.

Рассмотрим переходы $L\to L'=L+2$, для которых

$$\langle n'L'0|\hat{V}_{11}|nL0\rangle=0, \tag{24}$$

т. к. матричные элементы скаляров диагональны по числу L.

$$\int_0^R R_{n'L'}R_{nL}r\,dr=0, \text{ откуда} \tag{25}$$

$$\langle n'L'0|\hat{V}|_{12}nL0\rangle=0. \tag{26}$$

$$\int_0^R R_{n'L}R'_{nL}r\,dr=0, \text{ откуда} \tag{27}$$

$$\langle n'L'0|\hat{V}_{12}|nL0\rangle=0. \tag{28}$$

При выводе (25)—(28) применялись свойства эрмитовости матричных элементов и формулы

$$\int_0^R R'_{n'L'}R'_{nL}r^2dr=-L(L+1)\int_0^R R_{n'L'}R_{nL}dr=-L'(L'+1)\int_0^R R_{nL}R_{n'L'}dr=0, \tag{29}$$

$$\int_0^R R_{n'L'}R'_{nL}r\,dr=-\int_0^R R'_{n'L'}R_{nL}r\,dr. \tag{30}$$

Случай $L\to L-2$ рассматривается аналогично.

Таким образом, для переходов $L\to L\pm 2$

$$\langle n'L'm|\hat{V}_1|nLm\rangle=0, \tag{31}$$

и вклад оператора $\hat{V}_1$ в поправку второго порядка к энергетическим уровням равен

$$E_1=\sum_{n'=0}^{\infty}{}' \frac{|\langle n'Lm|\hat{V}_1|nLm\rangle|^2}{E^{(0)}_{nL}-E^{(0)}_{n'L}}=4\alpha^2\beta^2\left(\frac{m^2}{L(L+1)}-\frac{1}{3}\right)^2\frac{L^2(L+1)^2}{(2L-1)^2(2L+3)^2}\times$$

$$\times\sum_{n'=0}^{\infty}{}'\frac{\left[\int_0^R R_{n'L}R_{nL}r\,dr\right]^2}{E^{(0)}_{nL}-E^{(0)}_{n'L}}, \tag{32}$$

штрих у знака суммы здесь и ниже означает, что при суммировании по n' надо опустить член с $n'=n$.

Перейдем к вычислению вклада оператора $\hat{V}_2$ во второй порядок. Имеем

$$\hat{V}_2=\hat{V}_{21}+\hat{V}_{22}+\hat{V}_{23}, \tag{33}$$

где

$$\hat{V}_{21}=\frac{\hbar}{9M}\beta^2\left(\Delta_0-3\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)-\frac{4\alpha}{9}\beta^2\left(\frac{1}{r}-\frac{3z^2}{r^3}\right),$$
$$\hat{V}_{22}=-\frac{2\hbar^2}{9M}\beta^2\Delta_0+\frac{7\alpha\beta^2}{18r},\quad \hat{V}_{23}=-\frac{3\alpha\beta^2z^4}{2r^5}. \tag{34}$$

Аналогично (11), (12), (13) и (14) получим:

$$<nLm|\hat{V}_{21}|nLm>=\frac{20}{3}\beta^2\left(\frac{m^2}{L(L+1)}-\frac{1}{3}\right)\frac{L(L+1)}{(2L-1)(2L+3)}E_{nL}^{(0)}, \tag{35}$$

$$<nLm|\hat{V}_{22}|nLm>=-\frac{11}{9}\beta^2E_{nL}^{(0)}. \tag{36}$$

Далее:

$$<nLm|\hat{V}_{23}|nLm>=\frac{9\beta^2}{(2L-1)(2L+1)(2L+3)}E_{nL}^{(0)}\times$$
$$\times\left(\frac{(L^2+2L-m^2)^2-1}{2L+5}+\frac{(L^2-m^2-1)^2-1}{2L-3}\right), \tag{37}$$

здесь использовалась известная формула для сферических функций:

$$Y_{Lm}\cdot\cos\vartheta=\left(\frac{(L+1)^2-m^2}{4(L+1)^2-1}\right)^{1/2}\cdot Y_{L+1,m}+\left(\frac{L^2-m^2}{4L^2-1}\right)^{1/2}\cdot Y_{L-1,m}. \tag{38}$$

Собирая все члены, во втором порядке теории возмущений для величины расщепления энергетических уровней в эллипсоидальном микрокристалле окончательно получим:

$$E_{nLm}-E_{nL}^{(0)}=4\alpha^2\beta^2\left(\frac{m^2}{L(L+1)}-\frac{1}{3}\right)^2\frac{L^2(L+1)^2}{(2L-1)^2(2L+3)^2}\times$$
$$\times\sum_{n'=0}^{\infty}{}'\frac{\left[\int_0^R R_{n'L}R_{nL}r\,dr\right]^2}{E_{nL}^{(0)}-E_{n'L}^{(0)}}-\frac{11\beta^2}{9}E_{nL}^{(0)}+\frac{20\beta^2}{3}\left(\frac{m^2}{L(L+1)}-\frac{1}{3}\right)\times$$
$$\times\frac{L(L+1)}{(2L-1)(2L+3)}E_{nL}^{(0)}+\frac{9\beta^2}{(2L-1)(2L+1)(2L+3)}\times$$
$$\times\left(\frac{(L^2+2L-m^2)^2-1}{2L+5}+\frac{(L^2-m^2-1)^2-1}{2L-3}\right)E_{nL}^{(0)}. \tag{39}$$

Чтобы не иметь дело с бесконечным рядом от интеграла, неинтегрируемого в квадратурах, поступим следующим образом.

Рассмотрим сферический микрокристалл радиуса

$$\rho_{Lm}=R(1+\varepsilon_1\beta+\varepsilon_2\beta^2), \tag{40}$$

где $R=(a^2c)^{1/3}$, а $\varepsilon_1,\varepsilon_2$—некоторые константы. Уравнение границы есть

$$x^2+y^2+z^2=\rho_{Lm}^2. \tag{41}$$

Сделаем замену

$$x \to x_0\rho_{Lm}/R, \quad y \to y_0\rho_{Lm}/R, \quad z \to z_0\rho_{Lm}/R. \tag{42}$$

Далее, применяя теорию возмущений по параметру β, во втором порядке получим:

$$E(\rho_{Lm}) - E^{(0)}_{nL} = \alpha^2 \varepsilon_1^2 \beta^2 \sum_{n'=0}^{\infty}{}' \frac{\left[\int\limits_0^R R_{n'L} R_{nL} r dr\right]^2}{E^{(0)}_{nL} - E^{(0)}_{n'L}} - \varepsilon_1^2 \beta^2 E^{(0)}_{nL}, \tag{43}$$

где $E(\rho_{Lm})$ —энергия электрона в сферическом микрокристалле радиуса (40). Примем $\varepsilon_2=0$, а

$$\varepsilon_1 = -2\left(\frac{m^2}{L(L+1)} - \frac{1}{3}\right)\frac{L(L+1)}{(2L-1)(2L+3)}. \tag{44}$$

Тогда (40) примет вид:

$$\rho_{Lm} = R\left(1 - \left(\frac{m^2}{L(L+1)} - \frac{1}{3}\right)\frac{2L(L+1)}{(2L-1)(2L+3)}\beta\right). \tag{45}$$

С учетом (43) и (44), (39) преобразуется к виду:

$$E_{nLm} = E(\rho_{Lm}) + 4\beta^2\left(\frac{m^2}{L(L+1)} - \frac{1}{3}\right)^2 \frac{L^2(L+1)^2}{(2L-1)^2(2L+3)^2} E^{(0)}_{nL} -$$
$$- \frac{11\beta^2}{9} E^{(0)}_{nL} + \frac{20\beta^2}{3}\left(\frac{m^2}{L(L+1)} - \frac{1}{3}\right)\frac{L(L+1)}{(2L-1)(2L+3)} E^{(0)}_{nL} +$$
$$+ \frac{9\beta^2}{(2L-1)(2L+1)(2L+3)}\left(\frac{(L^2+2L-m^2)^2-1}{2L+5} +\right.$$
$$\left. + \frac{(L^2-m^2-1)^2-1}{2L-3}\right) E^{(0)}_{nL}, \tag{46}$$

где ρ_{Lm} дается уже выражением (45). Из (46) следует, что учет эллипсоидальности микрокристалла, во-первых, снимает вырождение энергии примесных состояний по модулю квантового числа m, во-вторых, уменьшает межуровневое расстояние, а сами уровни смещаются вверх или вниз в зависимости от размера микрокристалла. Например, для основного состояния

$$E_{100} = (1 - 0{,}63\beta^2) E^{(0)}_{10}. \tag{47}$$

Для волновых функций поправка первого порядка, как известно, определяется выражением

$$\Psi^{(1)}_{nLm} = \sum_{n'L'm'}{}' \frac{\langle n'L'm' | \hat{V}_1 | nLm \rangle}{E^{(0)}_{nL} - E^{(0)}_{n'L'}} \Psi^{(0)}_{n'L'm'}. \tag{48}$$

Но матричный элемент, стоящий под знаком суммы в (48), дается выражением (23), поэтому при учете эллипсоидальности волновые функции электрона в первом порядке теории возмущений представляются в виде волновых функций в сферическом микрокристалле радиуса (45).

Отметим, что величина β может быть выражена через параметры эллипсоида:

$$\beta=-3\frac{2a/c+1-(10a/c-(2a/c-1)^2)^{1/2}}{4a/c-1}\approx\frac{c-a}{c}. \tag{49}$$

При этом $a/c<1\Rightarrow\beta>0$ в случае вытянутого эллипсоида, а в случае сплюснутого— $a/c>1\Rightarrow\beta<0$.

ЛИТЕРАТУРА

1. **D. S. Chuu, C. M. Hsiao, W. N. Mei.** Phys. Rev. B., **46**, 3898 (1992).
2. **L. Brus.** Appl. Phys. A., **53**, 465 (1991).
3. **А. И. Екимов, Ал. Л. Эфрос.** ФТТ, **31**, №8, 192 (1989).
4. **Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц.** Квантовая механика. М., Наука, 1974.

ON THE THEORY OF IMPURITY STATES IN THE ELLIPSOIDAL MICROCRYSTALS

A. S. GASPARIAN, E. M. KAZARIAN

The energy states and wave functions of a hydrogen-like impurity placed in the geometric center of a semiconductor microcrystal of ellipsoidal shape are investigated by the method of perturbations theory.

ԷԼԻՊՍՈԻԴԱՅԻՆ ՄԻԿՐՈԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ ԽԱՌՆՈՒՐԴԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԻ ՏԵՍՈՒԹՅԱՆ ՄԱՍԻՆ

Ա. Ս. ԳԱՍՊԱՐՅԱՆ, Է. Մ. ՂԱԶԱՐՅԱՆ

Խոտորումների քվանտային տեսությամբ ուսումնասիրված են էլիպսոիդային ձևի կիսահաղորդչային միկրոբյուրեղներում ջրածնանման խառնուրդի վիճակները եռաչափ անվերջ պոտենցիալ հորի մոտավորությամբ։