

ПРИМЕСНЫЕ СОСТОЯНИЯ В КВАЗИНУЛЬМЕРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУРАХ С СИЛЬНО СПЛЮСНУТОЙ (ВЫТЯНУТОЙ) ЭЛЛИПСОИДАЛЬНОЙ ФОРМОЙ

А. С. ГАСПАРЯН, Э. М. КАЗАРЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 4 июля 1997г.)

В адиабатическом приближении получены аналитические выражения для энергетических уровней нижней части спектра и соответствующих им волновых функций электрона в непроницаемом полупроводниковом сильно сплюснутом (вытянутом) эллипсоиде вращения, в центре которого расположена водородоподобная примесь. Показано, что в рассмотренных структурах возможно получение на порядок больших энергий, чем в сферических, при одинаковых объемах, а также достигается полное снятие вырождения энергии примесных состояний, за исключением двукратного, связанного с модулем двумерного орбитального квантового числа.

Исследование размерных эффектов в полупроводниковых структурах с пониженной мерностью является в настоящее время одним из наиболее интенсивно развивающихся направлений физики твердого тела. При рассмотрении подобных объектов возникает необходимость решения кулоновской задачи со специфическими граничными условиями.

Одним из наиболее важных примеров квазинульмерных структур являются так называемые микрокристаллы, выращенные в различных диэлектрических средах (см. [1—3]). На данный момент теоретически хорошо исследованы микрокристаллы сферической формы [4, 5], поэтому представляется естественной попытка изучения примесных состояний в эллипсоидальных микрокристаллах. С другой стороны, как известно, важной особенностью физических систем, в которых движение носителей заряда пространственно ограничено (волновая функция равна нулю на конечных расстояниях от силового центра), является возможность управления энергетическим спектром таких систем при помощи изменения их геометрических параметров. С этой точки зрения эллипсоидальная форма лучше сферической вследствие наличия двух геометрических параметров (имеется в виду эллипсоид вращения).

Таким образом, изучение физических свойств эллипсоидальных систем является актуальной проблемой, а рассмотрение примесных состояний в квазинульмерных структурах с сильно сплюснутой или вытянутой эллипсоидальной формой представляет собой первый шаг на пути ее решения.

В настоящей работе исследование проводится в адиабатическом приближении и в рамках метода эффективной массы, предполагая тем

самым, что все существенные длины велики по сравнению с постоянной решетки.

1. Сильно сплюснутая эллипсоидальная потенциальная яма

Рассмотрим непроницаемый сильно сплюснутый эллипсоид вращения с диэлектрической постоянной ϵ , в центре которого имеется примесь заряда Ze . Тогда потенциальную энергию электрона можно представить в виде:

$$U(x, y, z) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{\epsilon(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}}, & \frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} < 1 \\ \infty, & \frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} > 1, \text{ где } b \ll a. \end{cases} \quad (1)$$

Очевидно, что для нахождения энергетических уровней нижней части спектра и соответствующих им волновых функций при движении электрона в таком эллипсоиде важное значение имеют длины полуосей эллипсоида по сравнению с эффективным боровским радиусом электрона

$a_0 = \frac{\hbar^2 \epsilon}{\mu Ze^2}$, где $\hbar$ и μ соответственно постоянная Планка и эффективная масса электрона в данной среде.

1.1. $a \gg a_0 \gg b$

В этом случае адиабатическое приближение применимо, и кроме того, при рассмотрении движения вдоль оси «z» («быстрая» подсистема) кулоновское взаимодействие может быть учтено как возмущение. Тогда в нулевом приближении получаем энергетический спектр и волновые функции одномерных стоячих волн со стенками, расположенными на расстоянии

$$b(x, y) = b \sqrt{1 - \frac{x^2 + y^2}{a^2}} \quad (2)$$

от начала координат. В низших состояниях частица локализована на расстояниях $\rho = \sqrt{x^2 + y^2} \ll a$, поэтому выражение для энергии стоячих волн можно разложить в ряд по степеням $\frac{\rho^2}{a^2}$, сохранив первые два члена.

При определении поправки, вносимой кулоновским взаимодействием, учтем, что $\rho \sim a_0 \Rightarrow \rho \gg |z|$, поэтому $\sqrt{\rho^2 + z^2} \approx \rho$. Тогда для энергии одномерного движения получим:

$$U(\rho) = \frac{\hbar^2 \pi^2 N_1^2}{8\mu b^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2 N_1^2}{8\mu a^2 b^2} \rho^2 - \frac{Ze^2}{\epsilon \rho}, \quad (3)$$

где $N_1 = 1, 2, \dots$ — квантовое число одномерных стоячих волн.

Поправка к волновым функциям равна нулю вследствие их ортогональности.

Перейдем к решению двумерного уравнения Шредингера с оператором потенциальной энергии (3).

1.1a. $a_0 \ll \sqrt{ab}$

При этом условии второй член из выражения (3) может рассматриваться как возмущение. Тогда в нулевом приближении задача сведется к двумерной кулоновской. Найдя затем поправку, вносимую осцилляторным членом, для энергетических уровней нижней части спектра трехмерной системы получим:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2 N_1^2}{8\mu b^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2 \left(N - \frac{1}{2}\right)^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2 N_1^2}{16\mu} \cdot \frac{a_0^2}{a^2 b^2} \left(N - \frac{1}{2}\right)^2 \times \\ \times \left[5 \left(N - \frac{1}{2}\right)^2 + 1 - 3 \left(m^2 - \frac{1}{4}\right) \right], \quad (4)$$

где $N=1, 2, \dots$ — двумерный аналог трехмерного главного квантового числа, $|m|=1, 2, \dots, N-1$ — двумерное орбитальное квантовое число.

Из применимости теории возмущений следует ограничение на квантовые числа:

$$N_1^2 \left(N - \frac{1}{2}\right)^4 \left| 5 \left(N - \frac{1}{2}\right)^2 + 1 - 3 \left(m^2 - \frac{1}{4}\right) \right| \leq \frac{ab}{a_0^2}, \quad (5)$$

которое всегда выполняется для низших состояний.

Волновые функции трехмерного движения в нулевом приближении представляются в виде произведения волновых функций одномерных стоячих волн и двумерных кулоновских. Соответствующую поправку нетрудно будет найти по теории возмущений.

1.1б. $a_0 \sim \sqrt{ab}$

Теперь всю потенциальную энергию (разность между вторым и третьим членом в выражении (3)) будем рассматривать как возмущение. Тогда, согласно [6], для энергетических уровней найдем:

$$E \approx \frac{\hbar^2 \pi^2 N_1^2}{8\mu b^2} \pm \frac{\hbar^2}{\mu a_0^2} \exp \left| -1 \left| 1 - \frac{\pi^2 N_1^2}{32} \right| \right|, \quad (6)$$

где берется верхний знак в случае $a_0 > \sqrt{ab}$ и нижний при $a_0 < \sqrt{ab}$.

1.1в. $a_0 \gg \sqrt{ab}$

Здесь в нулевом приближении получаем задачу о движении плоского осциллятора. Вычислив по теории возмущений поправку, вносимую кулоновским взаимодействием, для энергетических уровней трехмерной системы найдем:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2 N_1^2}{8\mu b^2} + \frac{\hbar^2 \pi N_1}{2\mu ab} (N_2 + 1) + E_k^{(1)}, \quad (7)$$

где

$$E_k^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{\mu a_0} \cdot \frac{\Gamma\left(|m_1| + \frac{1}{2}\right)}{|m_1|!} \lambda^{1/2} \times$$

$$\times \left\{ 1 + \sum_{s=0}^{\frac{N_2-|m_1|}{2}-1} \frac{(N_2-|m_1|)/2((N_2-|m_1|)/2-1) \cdots ((N_2-|m_1|)/2-S)}{((S+1)!)^2 \left(|m_1| + \frac{1}{2}\right) \left(|m_1| + \frac{3}{2}\right) \cdots \left(|m_1| + \frac{1}{2} + S\right)} \times \right. \\ \left. \times \left(-S - \frac{1}{2}\right) \left(-S + \frac{1}{2}\right) \cdots \left(S - \frac{1}{2}\right) \right\}, \quad (8)$$

$i = \frac{\pi N_1}{2ab}$, $N_2 = 0, 1, \dots$; m_1 — квантовые числа двумерного осциллятора.

причем величина $\frac{N_2-|m_1|}{2}$ должна быть целой неотрицательной, $\Gamma(x)$ — гамма функция.

В частности, для поправки к основному состоянию из (8) получим

$$E_0^{(1)} = - \frac{\hbar^2}{\mu a_0} \sqrt{\pi}, \quad (9)$$

а для низших возбужденных уровней ряд можно заменить его первым членом:

$$E_n^{(1)} \approx - \frac{\hbar^2}{\mu a_0} \cdot \frac{\Gamma(|m_1|+1/2)}{|m_1|!} i^{1/2} \left(1 - \frac{1}{2(2|m_1|+1)} \right). \quad (10)$$

Волновые функции в нулевом приближении представляются в виде произведения волновых функций одномерных стоячих волн и плоского осциллятора, а вклад кулоновского взаимодействия можно найти по теории возмущений.

При дальнейшем увеличении боровского радиуса относительно полюсов эллипсоида задача, очевидно, сведется к рассмотренной в п. 1.1 в.

1.2. $a \gg b \gg a_0$

В этом случае размерное квантование рассматривается как возмущение. Поэтому энергию системы можно представить в виде суммы энергетических спектров водородоподобного атома и свободной частицы в непроницаемом сильно сплюснутом эллипсоиде вращения [7]. Аналогичным образом определяются волновые функции.

1.3. $a \gg b \sim a_0$

Очевидно, что при данном условии трехмерную систему нельзя разложить на «быструю» и «медленную» подсистемы, вследствие чего адиабатическое приближение не применимо. Однако в случае, когда $\frac{b-a_0}{b} \approx 1+\beta$, где $|\beta| \ll 1$, можно, представив граничное условие в виде

$$\frac{x^2+y^2}{a_0^2} + \frac{z^2}{b^2} < 1, \quad (11)$$

т.к. в плоскости (x, y) локализация электрона происходит за счет кулоновского поля, свести задачу к рассмотренной в работе [8] (оп-

ределение энергетического спектра и волновых функций электрона в эллипсоидальном микрокристалле, мало отличающемся от сферического).

2. Сильно вытянутая эллипсоидальная потенциальная яма

Рассмотрим движение электрона в поле

$$U(x, y, z) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{\varepsilon(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}}, & \frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} < 1 \\ \infty, & \frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} > 1, \text{ где } b \gg a. \end{cases} \quad (12)$$

2.1. $b \gg a \gg a$

Тогда для «быстрой» подсистемы в нулевом приближении имеем движение в бесконечно глубокой двумерной потенциальной яме радиуса

$$a(z) = a \sqrt{1 - \frac{z^2}{b^2}} \quad (\text{см. [7]}). \quad (13)$$

Учитывая, что в низших состояниях $|z| \ll b$, и вид кулоновской поправки, для энергии двумерного движения имеем:

$$U_{n,M}(z) = \frac{\hbar^2 \alpha_{n+1,|M|}^2}{2\mu a^2} + \frac{\hbar^2 \alpha_{n+1,|M|}^2}{2\mu a^2 b^2} z^2 - \frac{\hbar^2 C_{n,M}^2}{\mu a b} \int_0^{a(z)} J_M^2 \left(\frac{\alpha_{n+1,|M|}}{a(z)} \rho \right) \frac{\rho d\rho}{\sqrt{\rho^2 + z^2}}, \quad (14)$$

где $n=0, 1, \dots$; M — квантовые числа задачи о свободном движении в двумерной круговой потенциальной яме, $\alpha_{n+1,|M|} > 0$ — $(n+1)$ -ый корень сферической функции Бесселя $J_M(\alpha_{n+1,|M|}) = 0$ в порядке возрастания; $C_{n,M}$ определяется из условия нормировки сферических бesselевых функций. Введем обозначение

$$a_0 = \min(a, \sqrt{ab}). \quad (15)$$

В случае возбужденных состояний $|z| \sim |a_0| \gg \rho$ и интеграл из (14) сведется к нормировочному. В основном состоянии $|z| \sim \rho$ и замена $\sqrt{\rho^2 + z^2}$ на $|z|$ недопустима. Этот случай требует отдельного рассмотрения.

Ниже ограничимся основным уровнем одномерного движения, относящегося к основному уровню движения в поперечной плоскости. Волновую функцию двумерного движения возьмем в виде

$$J_0 = C_{0,0} \left(1 - \frac{\bar{\rho}^2}{4} + \frac{\bar{\rho}^4}{64} - \frac{\bar{\rho}^6}{2304} \right), \quad (16)$$

где $\bar{\rho} = \frac{\alpha_{1,0}}{a(z)} \rho$, $\alpha_{1,0} \approx 2,4 \Rightarrow 0 \leq \bar{\rho} \leq 2,4$.

Из условия нормировки найдем

$$C_{0,0} = \frac{2,68}{a(z)}. \quad (17)$$

Заметим, что выбрав волновую функцию в виде (16), мы ограничились членами порядка 10^{-2} . Величину

$$\delta U(z) = U_{0,0}(z) - \frac{\hbar^2 z_{1,0}^2}{2\mu a^2} \quad (18)$$

можно рассматривать как возмущение, т. к.

$$|\delta U(z)| \ll \frac{\hbar^2}{\mu a^2}. \quad (19)$$

Тогда, согласно [6], основной уровень энергии трехмерного движения определится выражением

$$E_0 = \frac{\hbar^2 z_{1,0}^2}{2\mu a^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(\int_0^{a_0} \delta U(z) dz \right)^2. \quad (20)$$

здесь расходящийся интеграл обрезан сверху на расстояниях $|z| \sim a_0$. Выполним интегрирование и разложив соответствующие биномы в ряд по степеням $\frac{a_0}{a} \ll 1$, для энергии основного состояния получим:

$$E_0 = \frac{\hbar^2 z_{1,0}^2}{2\mu a^2} - \frac{2\hbar^2}{\mu} \left(\frac{a_0^3}{a^2 b^2} - \frac{1}{a_0} \ln \frac{2a_0}{a} \right)^2. \quad (21)$$

Если $a_0 \ll \sqrt{ab}$ или $a_0 \sim \sqrt{ab}$, то выражение (21) упростится и примет вид

$$E_0 \approx \frac{\hbar^2 z_{1,0}^2}{2\mu a^2} - \frac{2\hbar^2}{\mu a_0^2} \cdot \ln^2 \frac{2a_0}{a}. \quad (22)$$

В случае $a_0 \gg \sqrt{ab}$ (21) сведется к виду

$$E_0 \approx \frac{\hbar^2 z_{1,0}^2}{2\mu a^2} + \frac{2\hbar^2}{\mu ab} \left(1 - \frac{\sqrt{ab}}{a_0} \ln 2 \sqrt{\frac{b}{a}} \right)^2, \quad (23)$$

где берется верхний знак, если выражение в скобках положительно, и нижний — если отрицательно.

Перейдем к рассмотрению возбужденных уровней трехмерной системы, не конкретизируя состояния двумерного движения «быстрой» подсистемы. Для этого нужно решить одномерное уравнение Шредингера в поле

$$U_{n,M}(z) = \frac{\hbar^2 z_{n+1,M}^2}{2\mu a^2} + \frac{\hbar^2 z_{n+1,M}^2}{2\mu a^2 b^2} z^2 - \frac{\hbar^2}{\mu a_0 |z|}, \quad (24)$$

где $n, M \neq 0$.

2.1a. $a_0 \ll \sqrt{ab}$

Пренебрегая вторым членом в (24), уравнение Шредингера для $z > 0$ сводится к виду, по форме совпадающему с уравнением для радиальных волновых функций S -состояний трехмерной кулонов-

кой задачи (см. [6]). При $z < 0$ волновые функции могут быть продолжены как $\Psi(z) = \Psi(-z)$ или $\Psi(z) = -\Psi(-z)$.

2.1б. $a_b \sim \sqrt{ab}$

Возбужденные состояния у «медленной» подсистемы в этом случае отсутствуют. Энергия основного состояния трехмерного движения задается выражением (22).

2.1в. $a_b \gg \sqrt{ab}$

При исследовании возбужденных состояний можно пренебречь в (24) кулоновским взаимодействием и получить задачу о движении одномерного осциллятора.

2.2. $b \sim a_b \gg a$

В этом случае для энергии основного состояния нельзя пользоваться формулой (23), т. к. она дает завышенное, почти в два раза, значение энергии для нулевого уровня однородного осциллятора. Поэтому основной уровень трехмерного движения нужно рассматривать совместно с возбужденными, согласно способу из п. 2.1. в.

При дальнейшем увеличении параметра относительно полуосей эллипсоида возникает ситуация, аналогичная рассмотренной в п. 2.2.

В случае $b \gg a \gg a_b$ поправка к спектру трехмерной кулоновской задачи представляет собой энергию движения свободного электрона в непроницаемом сильно вытянутом эллипсоиде вращения. Соответственно определится поправка к волновым функциям (см. [7]). Наконец, при $b \gg a \sim a_b$ ситуация аналогична рассмотренной в п. 1.3.

Отметим, что волновая функция трехмерной системы во всех случаях представится в виде произведения волновых функций «быстрой» и «медленной» подсистем.

3. Обсуждение результатов

Подводя итог вышеизложенному, заметим, что в полупроводниковых структурах с сильно сплюснутой или вытянутой эллипсоидальной формой (СС или ВЭФ) можно достичь полного снятия вырождения энергии примесных состояний, за исключением двукратного, являющегося следствием симметрии гамильтониана задачи относительно отражений $x \rightarrow -x$, $y \rightarrow -y$, $z \rightarrow -z$. Это приводит к появлению близко расположенных подуровней, обеспечивающих гибкость управления энергетическим спектром, о чем упоминалось в предисловии.

Другой особенностью систем с СС или ВЭФ является возможность получения на порядок бо́льших энергий, чем в сферических системах (микросталлах), при одинаковых объемах. Это видно из сравнения значений, задаваемых выражениями (4), (6), (7), (21), (22) или (23) для конкретных полупроводников, с результатами, полученными в работах [4] или [5].

При рассмотрении квазиульмерных объектов с сильно вытянутой эллипсоидальной формой возникает ситуация, аналогичная возникающей в известной задаче Эллиота, Лудона: вследствие быстрого

движения в поперечной плоскости, устраняется «провал» при одномерном движении в кулоновском поле. Различие состоит в том, что в данном случае роль магнитного поля играет размерное квантование. Как видно из выражения (22), если пренебречь намагничиваемостью среды, то положив формально $a=2a_m$ (a_m — соответствующая магнитная длина), можно добиться совпадения результатов для энергий основного состояния (имеется в виду логарифмический член).

В заключение отметим, что все результаты настоящей работы имеют аналитический характер. Это значительно упростит дальнейшее исследование свойств рассмотренных систем, в частности, оптических.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. I. Ekimov et al. J. Luminesc., 46, 83 (1990).
2. A. I. Ekimov et al. J. Opt. Soc. Am. B., 10, 100 (1993).
3. M. Nirmal et al. Phys. Rev. Lett., 75, 3728 (1995).
4. D. S. Chuu, C. M. Hsiao, W. N. Mei. Phys. Rev. B., 46, 3898 (1992).
5. А. С. Гаспарян, Э. М. Казарян. Известия НАН Армении, Физика, 32, 83 (1997).
6. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. М., Наука, 1974.
7. В. М. Галицкий, Б. М. Карнаков, В. И. Коган. Задачи по квантовой механике. М., Наука, 1992.
8. А. С. Гаспарян, Э. М. Казарян. Известия НАН Армении, Физика, 32, 130 (1997).

IMPURITY STATES IN QUASI-ZERO DIMENSIONAL SEMICONDUCTING STRUCTURES WITH HEAVILY FLATTENED (STRETCHED) ELLIPSOIDAL FORM

A. S. GASPARIAN, E. M. KAZARIAN

In the adiabatic approximation the analytic expressions are obtained for energy levels of the lower part of spectrum and corresponding electronic wave functions in a non-transparent semiconducting heavily flattened (stretched) ellipsoid of revolution in the center of which a hydrogen-like impurity is located. It is shown that in the considered structures it is possible to obtain energies by one order higher than in spherical ones having the same volumes and also there is a full removal of degeneracy of impurity states energy except of twofold one, connected with the modulus of two-dimensional orbital quantum number.

ԽԱՌՆՈՒՐԴԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ ԽԻՍ ՍԵՂՄՎԱԾ (ՉԳՎԱԾ) ԷԼԻՊՍԱՐԴԱՅԻՆ ՉԵՎԻ ՔՎԱԶԻԶՐՈՉԱՓ ԿԻՍԱԶԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ ԿԱՌՈՅՎԱԾՔՆԵՐՈՒՄ

Ա. Ս. ԳԱՍՊԱՐՅԱՆ, Է. Մ. ԿԱԶԱՐՅԱՆ

Ադիաբատ մոտաձուրվյալում ստացված են էլեկտրոնի էներգիական սպեկտրի ստորին մակարդակների և համապատասխան ալիքային ֆունկցիաների անալիտիկ արտահայտություններ անթափանց կիսահաղորդչային խիստ սեղմված (ձգված) պտտման էլիպսարդում, որի կենտրոնում տեղադրված է ջրածնանման խառնուրդ: Ցույց է տրված, որ զնգածե կառուցվածքների համեմատությամբ, դիտարկված մոդելում հնարավոր է կարգով մեծ էներգիաների ստացում (միևնույն ծավալի դեպքում), ինչպես նաև խառնուրդային վիճակների էներգիայի ալյասերման վերացում, բացառությամբ բոտ երկչափ ուղեծային բվանտային թվի մոդուլի կրկնակի ալյասերման: