

УДК 621.315.592

СОСТОЯНИЕ ЭЛЕКТРОНА В РАЗМЕРНО-КВАНТОВАННОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ПРОВОЛОКЕ С ПОКРЫТИЕМ

М. М. АГАСЯН, А. А. КИРАКОСЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 5 августа 1998г.)

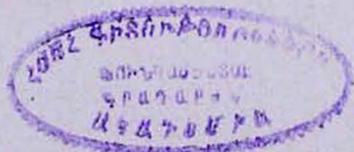
Рассмотрены состояния электрона в размерно-квантованной полупроводниковой проволоке, покрытой слоем другого полупроводника с большей, чем у проволоки, шириной запрещенной зоны, в предположении, что на внешней границе покрытия потенциал бесконечен (модель ступенчатой бесконечно глубокой потенциальной ямы – СБЯ). Найдены волновые функции, и получено уравнение для определения собственных значений энергии. Вариационным методом вычислена энергия связи водородоподобной примеси, находящейся на оси проволоки. Исследовано поведение энергетических уровней и энергии связи примеси в СБЯ из $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ в зависимости от концентрации сплава x и отношения эффективных масс.

1. Введение

Исследования свойств полупроводниковых структур с низкоразмерным газом носителей заряда, в первую очередь, квазиодномерных (Q1D) и квазиульмерных (Q0D) электронных систем, продолжают оставаться на переднем крае физики твердого тела и физики полупроводников [1,2]. Особенно впечатляюще успехи современных технологий в области создания низкоразмерных электронных систем с различными геометрическими формами [3-6]. Фактически новой степенью свободы для низкоразмерных систем становится топология электронного газа [7-10].

В данной работе рассмотрена задача определения энергетического спектра и волновых функций электрона в размерно-квантованной полупроводниковой проволоке круглого сечения, покрытой слоем другого полупроводника с большей, чем у проволоки, шириной запрещенной зоны. Предполагается, что на внешней границе покрывающего проволоку цилиндрического слоя потенциал бесконечен (модель ступенчатой бесконечно глубокой ямы (СБЯ)). Во второй части работы исследовано влияние покрывающего проволоку слоя на энергию связи примесного центра, находящегося на оси проволоки.

Определению энергии связи водородоподобного центра в Q1D структурах посвящено много работ [11-17]. В частности, в [13] и [14] исследовано поведение энергии связи примесного центра в квантовой проволоке из $GaAs$ круглого и прямоугольного сечений, соответственно, окруженной бесконечной средой из $Ga_{1-x}Al_xAs$, в зависимости от положе-



ния примесного центра. Было найдено, что энергия связи максимальна, когда примесь находится на оси проволоки. Из физических соображений очевидно, что как на уровне энергии электрона, так и на энергию связи примесного центра может оказать влияние также конечность толщины покрывающего слоя из-за возрастания влияния размерного квантования.

2. Волновые функции и спектр энергии

Рассмотрим состояния электрона в проволоке радиуса R_1 , покрытой слоем толщины $R_2 - R_1$. В приближении эффективной массы гамильтониан задачи имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_i} + V(r), \quad (1)$$

где m_i – эффективная масса электрона в проволоке ($i = 1$) и в слое ($i = 2$), \hat{p} – оператор импульса, а потенциальная энергия $V(r)$ в рамках рассматриваемой модели имеет вид

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r < R_1, \\ V_0, & R_1 \leq r \leq R_2, \\ \infty, & r > R_2, \end{cases} \quad (2)$$

где V_0 – величина скачка потенциальной энергии на границе проволоки и покрывающего слоя.

Следует заметить, что применимость метода эффективной массы в системе $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ связана с выяснением роли $\Gamma - X$ смешивания. Согласно [6], для V - и T -образных 1D-систем указанный эффект начинает играть определяющую роль при значениях $R < 50 \text{ \AA}$ и $x > 0,5$, что позволяет при использованных ниже значениях R_1 , R_2 и x пренебречь $\Gamma - X$ смешиванием.

Решения уравнения Шредингера с гамильтонианом (1) можно представить в следующей форме:

$$\Psi_{nmk}(y, \varphi, z) = \frac{C_1}{\sqrt{\pi R_1^2 L}} \exp[i(kz + m\varphi)] \begin{cases} J_m(\alpha_{nm}y), & y < y_1, \\ C_2 J_m(\beta_{nm}y) + C_3 K_m(\beta_{nm}y), & y_1 \leq y \leq y_2 \\ 0, & y > y_2, \end{cases} \quad (3)$$

где L – длина проволоки, k – волновое число, n, m – квантовые числа, J_m – функция Бесселя первого рода m -го порядка, I_m и K_m – модифицированные функции Бесселя соответственно второго и третьего рода порядка m , а также введены безразмерные параметры

$$y_1 = \frac{R_1}{a_B}, \quad y_2 = \frac{R_2}{a_B}, \quad \alpha_{nm} = \left(\frac{\varepsilon_{nm}}{E_R} \right)^{1/2}, \quad \beta_{nm} = \left[\frac{m_2}{m_1} (v_0 - \alpha_{nm}^2) \right]^{1/2}, \quad v_0 = \frac{V_0}{E_R}, \quad (4)$$

a_B – эффективный боровский радиус, E_R – эффективная ридберговская энергия в проволоке, ε_{nm} – собственные значения энергии поперечного

квантования. Входящие в (3) постоянные нормировки C_l ($l = 1, 2, 3$) даются выражениями

$$C_1 = \left[\int_0^1 J_m^2(\alpha_{nm} y_1 \tau) \tau d\tau + 2 \int_1^{y_2/y_1} [C_2 I_m(\beta_{nm} y_1 \tau) + C_3 K_m(\beta_{nm} y_1 \tau)]^2 \tau d\tau \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (5)$$

$$C_2 = \frac{J_m(\alpha_{nm} y_1) K_m(\beta_{nm} y_2)}{I_m(\beta_{nm} y_1) K_m(\beta_{nm} y_2) - I_m(\beta_{nm} y_2) K_m(\beta_{nm} y_1)}, \quad (6)$$

$$C_3 = -\frac{J_m(\alpha_{nm} y_1) I_m(\beta_{nm} y_2)}{I_m(\beta_{nm} y_1) K_m(\beta_{nm} y_2) - I_m(\beta_{nm} y_2) K_m(\beta_{nm} y_1)}. \quad (7)$$

Параметры α_{nm} , т.е. собственные значения ε_{nm} , определяются из условия непрерывности логарифмической производной волновой функции при $r = R_1$ (т.е. $y = y_1$) и являются корнями уравнения

$$\frac{1}{m_1} \frac{d}{dy_1} \ln J_m(\alpha_{nm} y_1) = \frac{1}{m_1} \frac{d}{dy_1} \ln [I_m(\beta_{nm} y_1) K_m(\beta_{nm} y_2) - I_m(\beta_{nm} y_2) K_m(\beta_{nm} y_1)]. \quad (8)$$

3. Расчет энергии связи

Воспользуемся вариационным методом для определения энергии связи водородоподобного центра, находящегося на оси проволоки, потенциал которого

$$U(r, z) = -\frac{e^2}{\chi \sqrt{r^2 + z^2}}. \quad (9)$$

В (9) предположено, что проволока и покрытие имеют одинаковые диэлектрические постоянные ($\chi_1 = \chi_2 = \chi$).

Следуя [13], пробную волновую функцию основного состояния будем искать в виде

$$\Psi_0 = N \exp[ikz - \lambda a_B \sqrt{y^2 + (z/a_B)^2}] \begin{cases} J_0(\alpha_{10} y), & 0 \leq y < y_1, \\ C_2 I_0(\beta_{10} y) + C_3 K_0(\beta_{10} y), & y_1 \leq y \leq y_2, \\ 0, & y > y_2, \end{cases} \quad (10)$$

где λ – вариационный параметр, N – постоянная нормировки, а C_2 и C_3 даются соответственно выражениями (6) и (7). После введения функций

$$f_j(y_1, \alpha, \gamma) = \int_0^1 J_0^2(\nu_1 \alpha t) K_j(2\gamma y_1 t) t^{j+1} dt, \quad (11)$$

$$g_j(y_1, y_2, \alpha, \gamma) = \int_0^{y_2/y_1} [C_2 I_0(\nu_1 \beta t) + C_3 K_0(\nu_1 \beta t)]^2 K_j(2\gamma y_1 t) t^{j+1} dt, \quad (12)$$

где $\gamma = \lambda a$, $\alpha = \alpha_{10}$ и $\beta = \beta_{10}$, приходим к следующему выражению для постоянной нормировки:

$$N = \{4\pi\alpha_B^3 y_1^3 [f_1(y_1, \alpha, \gamma) + g_1(y_1, y_2, \alpha, \gamma)]\}^{-1/2}. \quad (13)$$

Энергия связи примеси определяется как разность энергии основного состояния системы без примеси, т.е. ε_{10} , и энергии $\varepsilon(R_1, R_2)$ основного состояния с примесью:

$$\varepsilon_B(y_1, y_2) = \varepsilon_{10} - \varepsilon(y_1, y_2). \quad (14)$$

Переходя к безразмерным параметрам согласно (4) и воспользовавшись выражениями (11) и (12), после некоторых преобразований для энергии связи получим:

$$\varepsilon_B(y_1, y_2) = -\gamma^2 + \frac{2}{y_1} \frac{f_0 + g_0}{f_1 + g_1} - \gamma \frac{(1 - m_1/m_2)}{f_1 + g_1} [J_0^2(y_1, \alpha) K_0(2\gamma y_1) - \gamma g_1]. \quad (15)$$

При $m_1 = m_2$ и в пределе $R_2 \rightarrow \infty$ из формулы (15) следует результат работы [13]. Если же $m_1 \neq m_2$, то при $R_2 \rightarrow \infty$ из (15) получается выражение, отличающееся от полученного в [13] первым слагаемым в квадратных скобках, что означает, в свою очередь, уменьшение энергии связи по сравнению с полученным в [13] результатом.

4. Обсуждение результатов

Численные расчеты проведены в основном для проволоки из $GaAs$, покрытой слоем из $Ga_{1-x}Al_xAs$. Были использованы следующие значения параметров [17]: $m_1 = 0.067m_0$, $m_2 = (0.067 + 0.083x)m_0$ при изменении концентрации сплава x в пределах $0 \leq x \leq 0.45$, m_0 — масса свободного электрона, $V_0 = 1.247xQ_e$ (эВ), Q_e — доля разрыва потенциальной энергии, приходящая на зону проводимости, $E_R \approx 5.2$ мэВ, $\alpha_B \approx 104 \text{ \AA}$.

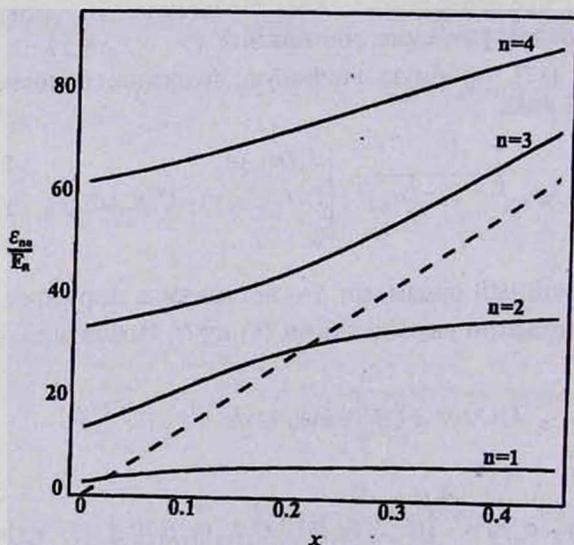


Рис.1. Зависимость энергетических уровней ε_{n0} от концентрации сплава x . Прерывистая прямая обозначает высоту потенциального барьера.

На рис.1 представлена зависимость первых четырех энергетических уровней ε_{n0} от концентрации x Al при значении радиуса проволоки $R_1 = 0.75a_B$ и радиуса покрывающего слоя $R_2 = 1.5a_B$ при $Q_e = 0.6$. Для значений $x \geq 0.0225$ уровень ε_{10} "входит" в яму и с ростом x , из-за поднятия потенциального барьера, "поднимается". Однако увеличение ε_{10} с ростом x замедляется ввиду того, что в области покрытия $m_2 > m_1$. При значениях $x \geq 0.21$ в яму "входит" уровень с энергией ε_{20} , которая в зависимости от x растет быстрее, чем ε_{10} . В рассматриваемой области $0 \leq x \leq 0.45$ уровни ε_{30} и ε_{40} находятся вне ямы. Прерывистая прямая на рис.1 представляет зависимость высоты потенциального барьера от x .

На рис.2 представлена зависимость ε_{n0} от радиуса проволоки R_1 при фиксированном радиусе покрытия $R_2 = 1.5a_B$ для значения $x = 0.4$ и $Q_e = 0.6$. В каждой паре кривых верхняя (прерывистая) соответствует случаю $m_1 = m_2$. При $R_1 = 0$ ε_{n0} совпадают (с учетом V_0) с уровнями энергии в проволоке из $Ga_{1-x}Al_xAs$ с радиусом $R_2 = 1.5a_B$. С увеличением R_1 электрон "падает" в яму, и ε_{10} стремится к значению первого энергетического уровня в проволоке из $GaAs$ с радиусом R_2 , т.е. к значению $2.52E_R \approx 13.1$ мэВ. Уровни энергии проявляют тенденцию к росту, что особенно заметно для больших n , и при стремлении R_1 к R_2 проходят через минимум. Такое поведение уровней энергии есть результат двух конкурирующих факторов: увеличения ширины ямы из $GaAs$, приводящего к понижению уровней, и увеличения массы в области барьера, приводящего к их повышению. Модельный расчет в предположении $m_1 = m_2$ (пунктирная кривая) обнаруживает отсутствие немонотонных участков на кривых $\varepsilon_{n0}(R_1)$.

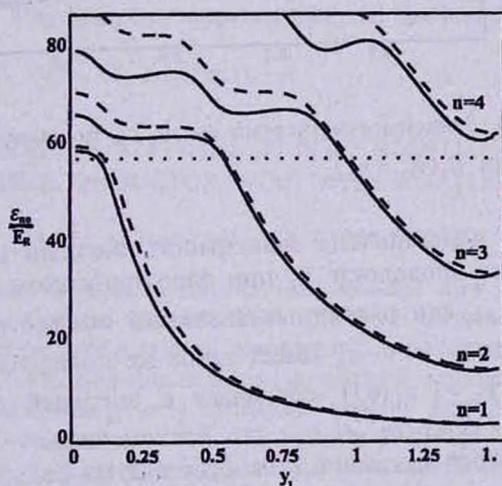


Рис.2. Зависимость энергетических уровней ε_{n0} от радиуса проволоки R_1 ($R_2 = 1.5a_B$, $x = 0.4$, $Q_e = 0.6$). Прерывистые кривые соответствуют предположению $m_1 = m_2$.

Влияние различия масс в проволоке и в области барьера на осцилляции энергетических уровней особенно четко проявляется в системе, состоящей из проволоки β -HgS и покрытия из CdS, эффективная масса электрона в которых равна соответственно $m_1 = 0.036m_0$ и $m_2 = 0.2m_0$ [7]. Из расчетов, выполненных для $R_2 = 1.5a_B$, очевидно усиление осцилляций $\varepsilon_{n0}(R_1)$ для состояний вне ямы, а также четкое проявление минимумов в области $R_1 \leq R_2$.

Найдена зависимость уровней энергии ε_{n0} от радиуса покрывающего слоя для системы $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ при значениях параметров $R_1 = a_B, x = 0.4, Q_e = 0.6$. При значении $R_2 = R_1$ уровни ε_{n0} совпадают с уровнями энергии в бесконечно глубокой потенциальной яме из GaAs с радиусом $R_1 = a_B$. С ростом R_2 $\varepsilon_{n0}(R_2)$ уменьшается, т.к. вследствие туннелирования в область барьера увеличивается размер области локализации электрона. При $R_2 = 1.25a_B$ значение $\varepsilon_{10}(R_2)$ практически совпадает с асимптотическим значением $\varepsilon_{10}(R_2 \rightarrow \infty)$. С увеличением номера энергетического уровня значения R_2 , соответствующие выходу $\varepsilon_{n0}(R_2)$ на асимптоту, смещаются в сторону больших значений.

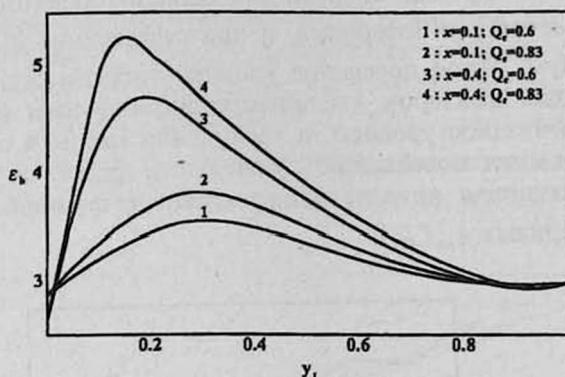


Рис.3. Зависимость энергии связи ε_b от радиуса проволоки R_1 ($R_2 = a_B$).

На рис.3 представлена зависимость энергии связи примесного центра от радиуса проволоки R_1 при фиксированном значении радиуса покрытия $R_2 = a_B$, для различных значений концентрации сплава x и параметра Q_e . При $y_2 \rightarrow \infty$ ε_b имеет такое же поведение, как в [13]. Для значений $y_1 = 0, y_2 = 1$ $\varepsilon_b(0,1)$ совпадает с энергией связи примеси в проволоке из $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ с бесконечным ограничивающим потенциалом. Малые значения ε_b соответствуют большим значениям x , т.к. с увеличением x масса электрона увеличивается. В области $0.15 \leq y_1 \leq 0.3$ $\varepsilon_b(y_1,1)$ имеет максимум, далее, с возрастанием y_1 уменьшается, достигая минимума в области $0.8 \leq y_1 \leq 0.9$. Однако, в отличие от случая $y_2 \rightarrow \infty$, $\varepsilon_b(y_1,1)$ убывает медленно, т.к. ε_{10} в упомянутой области

уменьшается медленнее, чем соответствующий энергетический уровень в случае $y_2 \rightarrow \infty$. Энергия связи $\varepsilon_s(y_1, 1)$ достигает значения $\varepsilon_s(y_1 = y_2 = 1)$, которое соответствует энергии связи примесного центра в проволоке из *GaAs* с радиусом a_b и с бесконечным ограничивающим потенциалом.

Для фиксированного значения R_1 $\varepsilon_s(y_1, y_2)$ имеет максимум при $y_1 = y_2$ и затем резко падает, стремясь к значению, полученному в [13] при $y_2 \rightarrow \infty$. Кривые, соответствующие большим значениям V_0 (в зависимости от x и Q_s), убывают сравнительно медленно.

ЛИТЕРАТУРА

1. Nanostructures and Quantum Effects, ed. by H.Sakaki and H.Noge, Springer-Verlag, Heidelberg, 1993.
2. Optical Properties of Semiconductor Quantum Dots, ed. by U.Woggon, Springer-Verlag, Heidelberg, 1997.
3. W.Wegschneider, L.N.Pfeiffer, M.M.Dignam, A.Pinchuk, K.W.West, S.L.McCall, and R.Hull. Phys. Rev. Lett, 71, 4071 (1993).
4. H.Akiyama, T.Someya, and H.Sakaki. Phys. Rev. B, 53, R10520 (1996).
5. H.Akiyama, T.Someya, and H.Sakaki. Phys. Rev. B, 53, R4229 (1996).
6. S.Pescetelli, A.Di Carlo, and P.Lugli. Phys. Rev. B, 56, R1668 (1997).
7. Н.В.Ткач, И.В.Пронин, А.М.Маханец. ФТТ, 40, 557 (1998).
8. C.L.Foden, M.L.Leadbeater, J.H.Burroughes, and M.Pepper. J. Phys. Cond. Mat., 6, L127 (1994).
9. C.L.Foden, M.L.Leadbeater, and M.Pepper. Phys. Rev. B, 52, R8646 (1995).
10. Jeongnim Kim, Lin-Wang Wang, and A.Zunger. Phys. Rev. B, 56, R15541 (1997).
11. J.A.Brum. Solid State Commun., 54, 179 (1985).
12. G.W.Bryant. Phys. Rev. B, 31, 7812 (1985).
13. J.W.Brown and H.N.Spector. J. Appl. Phys., 59, 1179 (1986).
14. F.A.P.Osorio, M.H.Degani, and O.Hipolito. Phys. Rev. B, 37, 1402 (1988).
15. G.Weber, P.A.Schulz, and L.E.Oliweira. Phys. Rev. B, 38, 2179 (1988).
16. Zhen-Yan Deng, Ting-Rong Lai, Jing-Lun Guo, and Shi-Wei Gu. J. Appl. Phys., 75, 7389 (1994).
17. S.Adachi. J. Appl. Phys., 58, R1 (1985).

ELECTRON STATES IN SIZE-QUANTIZED SEMICONDUCTOR WIRE WITH COATING

M. M. AGHASYAN, A. A. KIRAKOSYAN

The electron states in a size-quantized semiconductor wire with a semiconductor coating having greater than the wire forbidden band width are considered assuming that confining potential on the coating external boundary is infinite (the staircase infinitely well model - SIW). The wave functions are found and the equation is obtained for defining energy eigenvalues. The binding energy of a hydrogenic impurity located on the wire axis is calculated using the variational approach. The behavior of energy levels and the binding energy of impurity in the *GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs* SIW is investigated depending on the alloy concentration x and the effective-mass ratio.