

УДК 621.315.592

ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В СЛАБО СПЛЮСНУТОМ (ВЫТЯНУТОМ) ЭЛЛИПСОИДАЛЬНОМ МИКРОКРИСТАЛЛЕ ПРИ НАЛИЧИИ МАГНИТНОГО ПОЛЯ

К.Г. ДВОЯН, Э.М. КАЗАРЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 10 апреля 2000 г.)

Вариационным методом в рамках теории возмущений исследованы уровни энергии электрона в слабо сплюснутом (слабо вытянутом) эллипсоидальном микрокристалле при наличии однородного магнитного поля, направленного вдоль оси вращения эллипсоида. Для микрокристалла из $GaAs$ получена зависимость энергии электронных состояний от его линейных размеров, коэффициента эллипсоидальности и магнитного поля.

1. Введение

Исследование влияния квантовых размерных эффектов на физические процессы в полупроводниковых структурах с пониженной размерностью является в настоящее время одним из наиболее интенсивно развивающихся направлений физики твердого тела [1,2].

Одним из наиболее важных примеров низкоразмерных структур являются так называемые микрокристаллы, выращенные в диэлектрической матрице. Современные технологии допускают возможность выращивания микрокристаллов различных форм и размеров [3-11]. На данный момент хорошо исследованы микрокристаллы сферической формы [12,13]. В силу сферической симметрии физические свойства подобных объектов схожи со свойствами атомов. Различные исследования показывают, что подобные системы очень чувствительны к изменению формы ограничивающей поверхности. Иными словами, важной особенностью полупроводниковых структур, в которых движение носителей заряда пространственно ограничено, является геометрия задачи, которая сильно влияет на их энергетический спектр. В работах [10,11] показано, что сферическая симметрия допускает сходное с реальными атомами правило заполнения электронных оболочек. Последнее позволяет называть такие объекты искусственными атомами. Надо отметить, что это не имеет места при эллипсоидальной симметрии [10,11]. Поэтому актуальным является вопрос изучения энергетического спектра

электрона, находящегося в микрокристалле, форма которого отличается от сферического. В частности, речь идет о слабо сплюснутых или слабо вытянутых эллипсоидальных микрокристаллах.

В настоящей работе исследованы уровни энергии электрона в слабо сплюснутом или слабо вытянутом эллипсоидальном микрокристалле при наличии однородного магнитного поля.

2. Теория

Рассмотрим непроницаемый, слабо сплюснутый (вытянутый) эллипсоидальный микрокристалл в магнитном поле. Отметим, что эллипсоид вращения получается из сферы путем малой деформации, при которой объем не меняется. Тогда потенциальную энергию U электрона можно представить в виде

$$U = \begin{cases} 0; & \frac{X^2 + Y^2}{a^2} + \frac{Z^2}{c^2} \leq 1, \\ \infty; & \frac{X^2 + Y^2}{a^2} + \frac{Z^2}{c^2} > 1, \end{cases} \quad (1)$$

где a и c — полуоси эллипсоида. Гамильтониан системы будет иметь вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \left(\tilde{\mathbf{P}} - \frac{e}{s} \tilde{\mathbf{A}} \right)^2 + U, \quad (2)$$

где $\tilde{\mathbf{P}}$ — импульс частицы, $\tilde{\mathbf{A}}$ — векторный потенциал, s — скорость света, а μ — эффективная масса электрона. Сделаем масштабную замену переменных

$$X = \frac{ax}{R}; \quad Y = \frac{ay}{R}; \quad Z = \frac{cz}{R}, \quad (3)$$

в результате чего для эллипсоида получим уравнение сферы радиуса R :

$x^2 + y^2 + z^2 = R^2$. Вводя параметр эллипсоидальности $\beta = \frac{c-a}{c}$ и считая, что $|\beta| \ll 1$, можем написать

$$a \approx R \left(1 - \frac{\beta}{3} \right); \quad c \approx R \left(1 + \frac{2\beta}{3} \right); \quad R = (a^2 c)^{1/3}. \quad (4)$$

Для вектор-потенциала выбрана следующая калибровка:

$$\tilde{A}_x = \tilde{A}_z = 0; \quad \tilde{A}_y = BX. \quad (5)$$

Вышеупомянутая замена переменных приводит к следующему преобразованию гамильтониана:

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \left(\hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{s} \mathbf{A} \right)^2 + \frac{\beta}{3\mu} \left[\left(\hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{s} \mathbf{A} \right)^2 + \frac{2e}{s} \mathbf{A} \hat{\mathbf{P}} - \frac{2e^2}{s^2} \mathbf{A}^2 - 3\hat{\mathbf{P}}_z^2 \right] + U, \quad (6)$$

где $\mathbf{A}$ и $\mathbf{P}$ — соответственно, векторный потенциал и импульс частицы в новых переменных, а $\hat{\mathbf{P}}_z$ есть z -компонента оператора импульса. Запишем гамильтониан в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_1 + \hat{V}_2, \quad (7)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2\mu} - \frac{e}{\mu s} \mathbf{A} \hat{\mathbf{P}}, \quad \hat{V}_1 = \frac{e^2}{2\mu s^2} \mathbf{A}^2, \\ \hat{V}_2 &= \frac{\beta}{3\mu} \left[\left(\hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{s} \mathbf{A} \right)^2 + \frac{2e}{s} \mathbf{A} \hat{\mathbf{P}} - \frac{2e^2}{s^2} \mathbf{A}^2 - 3\hat{\mathbf{P}}_z^2 \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

Следует отметить, что вклады $\hat{V}_1$ и $\hat{H}_0$ в общий гамильтониан одного порядка, в то время как $\hat{V}_2$ является малой поправкой к нему (в силу того, что $|\beta| \ll 1$). В сферических координатах

$$A_r = A_\theta = 0, \quad A_\varphi = \frac{1}{2} B r \sin \theta.$$

Сначала решим уравнение Шредингера

$$\hat{H}_0 \Psi_0 = E_0 \Psi_0. \quad (9)$$

Переходя к безразмерным величинам, введем параметр $\gamma = \hbar \omega_c / 2E_R$, где $E_R = \hbar^2 / 2\mu a_B^2$ — ридберговская энергия, и циклотронную частоту $\omega_c = eB / \mu s$, где a_B — боровский радиус. Тогда уравнение (9) примет вид

$$(-\nabla^2 + \gamma L_z) \Psi_0 = \varepsilon_0 \Psi_0, \quad (10)$$

где L_z — z -компонента углового момента, а $\varepsilon_0 = E_0 / E_R$. Решением уравнения (10) является $\Psi_0 = N(J_{l+1/2}(K_{nl}r) / \sqrt{r}) Y(\theta, \varphi)$, где $J_{l+1/2}(K_{nl}r)$ — функция Бесселя полуцелого порядка, $K_{nl}R$ — корни уравнения Бесселя, $Y(\theta, \varphi)$ — сферическая функция, N — нормировочный коэффициент. Из граничного условия $\Psi_0(R) = 0$ для энергии найдем

$$\varepsilon_0 = K_{nl}^2 + \gamma m. \quad (11)$$

Далее, следуя результатам, полученным в работе [12], решим уравнение

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}_1) \Psi_1 = E_1 \Psi_1. \quad (12)$$



В безразмерных величинах оно запишется в виде

$$\left(-\nabla^2 + \gamma L_z + \frac{1}{4} \gamma^2 r^2 \sin^2 \theta\right) \Psi_1 = \varepsilon_1 \Psi_1. \quad (13)$$

Следуя вариационному методу, представим решение этого уравнения в виде

$$\Psi_1 = N_1 \frac{J_{l+\frac{1}{2}}(K_{10}r)}{\sqrt{r}} \times \exp\left(-\frac{1}{4} \gamma r^2 \sin^2 \theta\right) \times \exp(-\lambda r), \quad (14)$$

где λ – вариационный параметр, а нормировочный коэффициент, как легко показать, равен $N_1^{-2} = 2\pi A_1$, где

$$A_1 = \int_0^R \int_0^\pi dr d\omega J_{\frac{1}{2}}^2(K_{10}r) \times \exp\left(-\frac{1}{2} \gamma r^2 \sin^2 \theta\right) \times \exp(-2\lambda r) \times r \sin \theta. \quad (15)$$

Для основного состояния $l = m = 0$, и после некоторых преобразований получим, что

$$\varepsilon_1 = \langle \Psi_1 | -\nabla^2 + \gamma L_z + \frac{1}{4} \gamma^2 r^2 \sin^2 \theta | \Psi_1 \rangle = \lambda^2 + \frac{\pi^2}{R^2} + \gamma - \pi \gamma \frac{B_1}{A_1}, \quad (16)$$

где введены обозначения $K_{10} = \frac{\pi}{R}$ и

$$B_1 = \int_0^R \int_0^\pi dr d\omega J_{\frac{1}{2}}(K_{10}r) J_{\frac{3}{2}}(K_{10}r) \times \exp\left(-\frac{1}{2} \gamma r^2 \sin^2 \theta\right) \times \exp(-2\lambda r) r^2 \sin^3 \theta. \quad (17)$$

Далее, следуя первому порядку теории возмущений, введем

$$\Delta \varepsilon = \varepsilon - \varepsilon_1 = \langle \Psi_1 | \frac{\hat{V}_2}{E_R} | \Psi_1 \rangle \quad (18)$$

и для энергии окончательно имеем

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + \frac{2\beta}{3} \varepsilon_1 + \frac{2\beta}{3} \gamma m + \frac{\beta}{3} \cdot \frac{f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5}{A_1} - 2\beta \frac{f_6}{A_1}, \quad (19)$$

где через f_i ($i = 1, 2, \dots, 6$) обозначены следующие интегральные выражения:

$$f_1 = \left(\lambda^2 - \frac{\pi^2}{R^2} \right) \int_0^1 \int_{-1}^1 J_{\frac{1}{2}}^2(\pi t) \exp\left[-\frac{1}{2} \gamma R^2 t^2 (1-x^2)\right] \exp[-2R\lambda t] \cdot tx dx dt, \quad (20)$$

$$f_2 = 2\lambda \frac{\pi}{R} \int_0^1 \int_{-1}^1 J_{\frac{1}{2}}(\pi t) J_{\frac{3}{2}}(\pi t) \exp\left[-\frac{1}{2} \gamma R^2 t^2 (1-x^2)\right] \exp[-2R\lambda t] \cdot tx dx dt, \quad (21)$$

$$f_3 = 2 \frac{\pi}{R^2} \int_0^1 \int_{-1}^1 J_{\frac{1}{2}}(\pi t) J_{\frac{3}{2}}(\pi t) \exp\left[-\frac{1}{2} \gamma R^2 t^2 (1-x^2)\right] \exp[-2R\lambda t] \cdot x^2 dx dt, \quad (22)$$

$$f_4 = -\frac{\lambda}{R} \int_0^1 \int_{-1}^1 J_{1/2}^2(\pi t) \exp\left[-\frac{1}{2} \gamma R^2 t^2 (1-x^2)\right] \exp[-2R\lambda t] \cdot (1-x^2) dx dt, \quad (23)$$

$$f_5 = -\frac{\pi}{R^2} \int_0^1 \int_{-1}^1 J_{1/2}(\pi t) J_{3/2}(\pi t) \exp\left[-\frac{1}{2} \gamma R^2 t^2 (1-x^2)\right] \exp[-2R\lambda t] \cdot (1-x^2) dx dt, \quad (24)$$

$$f_6 = \frac{\gamma}{R^2} \int_0^1 \int_{-1}^1 J_{1/2}^2(\pi t) \exp\left[-\frac{1}{2} \gamma R^2 t^2 (1-x^2)\right] \exp[-2R\lambda t] \cdot t^3 (1-x^2) dx dt. \quad (25)$$

3. Обсуждение

Как видно из полученных результатов, в отличие от случая кулоновской задачи [13], в данном случае поправка к основному состоянию отлична от нуля уже в первом порядке теории возмущений. При отсутствии магнитного поля получается известный результат Митдала [14]. Как показано на рис.1, зависимость энергии от радиуса R в случае эллипсоидального микрокристалла отлична от случая сферического. При малых радиусах $R < 50 \text{ \AA}$ для сферического микрокристалла (кривые 1,2) энергия стремится к бесконечности быстрее, чем в случае эллипсоида.

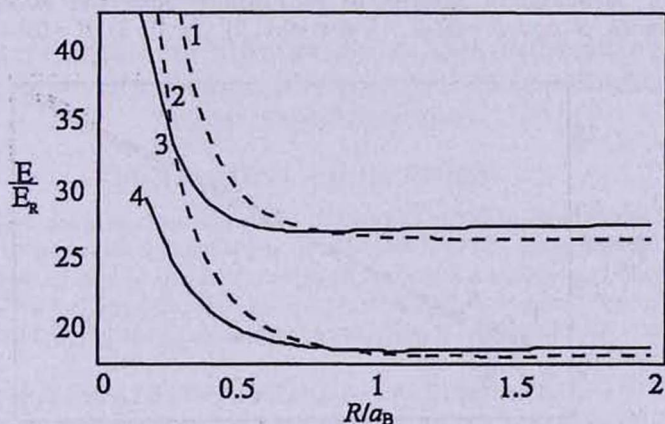


Рис.1. Зависимость энергии от радиуса микрокристалла. 1) $B=100 \text{ Т}$, $|\beta|=0$; 2) $B=50 \text{ Т}$, $|\beta|=0$; 3) $B=100 \text{ Т}$, $|\beta|=0.1$; 4) $B=50 \text{ Т}$, $|\beta|=0.1$.

Последнее связано с тем, что при изменении геометрических параметров энергия понижается вследствие увеличения потенциальной ямы. При малых радиусах размерное квантование подавляет магнитное, и малейшее изменение формы микрокристалла приводит к заметному изменению энергии частицы. С увеличением R энергии для эллипсоидального и сферического случаев отличаются малой поправ-

кой, вносимой возмущением. Как и следовало ожидать, при $B = 50$ Т и при $B = 100$ Т кривые зависимости энергии от магнитного поля аналогичны и лишь смещены вверх для большего значения магнитного поля.

Из рис.2 видно, что в зависимости от знака β энергия частицы смещается относительно сферического случая либо вверх, либо вниз. При $\beta > 0$ энергия увеличивается. Последнее является следствием того, что сфера в двух направлениях сжимается, а вытягивается в одном, и в итоге суммарный вклад в энергию является положительным.

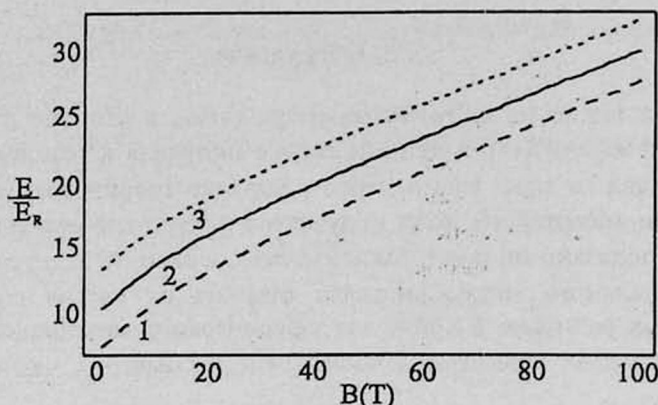


Рис.2. Зависимость энергии от магнитного поля для различных значений β при $R = 50$ Å. 1) $\beta = -0.1$, 2) $\beta = 0$, 3) $\beta = 0.1$.

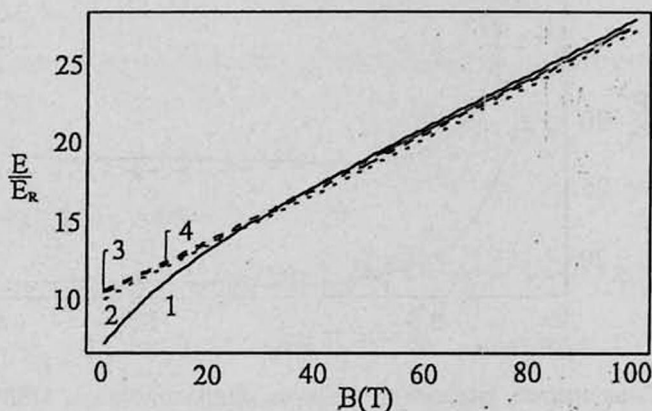


Рис.3. Зависимость энергии от магнитного поля для различных значений радиусов при $\beta = 0.1$. 1) $R = 50$ Å, 2) $R = 100$ Å, 3) $R = 150$ Å, 4) $R = 200$ Å.

Обратная картина наблюдается при $\beta < 0$. Как следует из рис.2, для малых значений магнитного поля энергия растет медленнее, чем при больших, что тоже является следствием конкуренции размерного и магнитного квантований. На рис.3 приведены кривые зависимости энергии от магнитного поля для различных радиусов. При малых

значениях B энергия в основном обусловлена размерным квантованием и медленно растет с увеличением R .

При больших значениях B магнитное квантование превалирует над размерным квантованием, и кривые сливаются.

ЛИТЕРАТУРА

1. "Self-Assembled InGaAs-GaAs Quantum Dots", New York, Academic Press, 1999. Semiconductors and Semimetals, vol. 60, edited by Robert K. Willardson.
2. Paul Harrison. Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics. University of Leeds, Leeds, United Kingdom, 1999.
3. M. Califano and P. Harrison. J. of Appl. Phys., 86, 5054 (1999).
4. O. Stier, M. Grundmann, and D. Bimberg. Phys. Rev. B, 59, 5688 (1999).
5. C. Pryor. Phys. Rev. B, 57, 7190 (1998).
6. D. Bimberg, M. Grundmann, and N.N. Ledentsov. MRS Bulletin, 23, 31 (1998).
7. M. Grundmann, N.N. Ledentsov, O. Stier, D. Bimberg, V.M. Ustinov, P.S. Kop'ev, and Zh.I. Alferov. Appl. Phys. Lett., 68, 979 (1996).
8. R. Heitz, A. Kalburge, Q. Xie, M. Grundmann, P. Chen, A. Hoffmann, A. Madhukar, and D. Bimberg. Phys. Rev. B, 57, 9050 (1998).
9. D. Bimberg, N.N. Ledentsov, M. Grundmann, F. Heinrichsdorff, V.M. Ustinov, P.S. Kop'ev, Zh.I. Alferov, and J.A. Lott. Solid-State Electronics, 42, 1433 (1998).
10. L. Serra, A. Puente, and E. Lipparini. Phys. Rev. B, 60, R 13966 (1999).
11. D.G. Austing, S. Sasaki, S. Tarucha, S.M. Reimann, M. Koskinen, and M. Manninen. Phys. Rev. B, 60, R 11514 (1999).
12. Zh. Xiao, J. Zhu, and F. He. J. of Appl. Phys., 79, 9181 (1996).
13. А.С. Гаспарян, Э.М. Казарян. Известия НАН Армении, Физика, 32, 130 (1997).
14. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. М., Наука, 1989.

ԷԼԵԿՏՐՈՆԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ ԹՈՒՅԼ ՍԵՂՄՎԱԾ (ԶԳՎԱԾ)

ԷԼԻՊՍՈԻԴԱՅԻՆ ՄԻԿՐՈՔՐԻՏՈՒԹՅՈՒՆ ՍԱԳՆԻՍԱԿԱՆ
ԴԱՇՏԻ ԱՌԿԱՅՈՒԹՅԱՄ

Կ.Գ. ԴՎՈՅԱՆ, Է.Մ. ԴԱԶԱՐՅԱՆ

Վարիացիոն մեթոդով, խոտորումների տեսության շրջանակներում ուսումնասիրված են էլեկտրոնի էներգիական վիճակները քայլ սեղմված (ձգված) էլիպսոիդային միկրոքրիտներում՝ էլիպսոիդի պատման առանցքով ուղղված համասեռ մագնիսական դաշտում: $GaAs$ միկրոքրիտների համար ուսումնասիրված է էլեկտրոնային վիճակների կախվածությունը նրա զծային չափերից, էլիպսոիդայինության գործակցից և մագնիսական դաշտից:

ELECTRON STATES IN A WEAKLY FLATTENED (ELONGATED)
ELLIPSOIDAL MICROCRYSTAL IN THE PRESENCE OF MAGNETIC FIELD

K.G. DVOYAN, E.M. KAZARYAN

Within the framework of perturbation theory, using the variation method, electron energy states in a weakly flattened (elongated) ellipsoidal microcrystal are studied in the presence of a uniform magnetic field directed along the rotational axis of ellipsoid. For the $GaAs$ microcrystal the electron energy states dependences on the linear length, coefficient of ellipticity and magnetic field are obtained.