

УДК 621.315

ВОДОРОДОПОДОБНЫЕ ПРИМЕСНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МИКРОКРИСТАЛЛАХ A^3B^5

А.А. АВETИСЯН, Э.М. КАЗАРЯН, А.А. САРКИСЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 12 ноября 1999 г.)

Исследованы примесные уровни в полупроводниковом микрокристалле с узкой запрещенной зоной. Показано, что при всех радиусах микрокристалла энергия связи в случае непараболической дисперсии составляет большую часть полной энергии, чем в случае микрокристалла со стандартной дисперсией.

1. Теория

Среди различных низкоразмерных полупроводниковых систем наибольший интерес в настоящее время привлекают микрокристаллы или квантовые точки, в которых из-за размерного квантования в трех направлениях проявляются электронные свойства, аналогичные атомным [1,2]. Нульмерное ограничение носителей заряда существенным образом сказывается на всех оптических свойствах квантовых точек и делает весьма перспективным использование гетероструктур с квантовыми точками в качестве активных сред полупроводниковых лазеров [3]. Часто для создания подобных структур используется ростовая мода Странски-Крастанова в системе таких узкозонных материалов A^3B^5 , как $InAs/GaAs$ или $InSb/GaAs$ [1].

В настоящей работе исследуются примесные уровни в непроницаемом полупроводниковом микрокристалле A^3B^5 с непараболическим законом дисперсии носителей заряда. В двухзонном приближении, хорошо оправданном для $InSb$, закон дисперсии носителей заряда аналогичен релятивистскому с заменой скорости света на параметр непараболическости s ($s \approx 10^8$ см/с) [4], связанный с шириной запрещенной зоны ε_g соотношением $\varepsilon_g = 2ms^2$ (m – эффективная масса электрона на дне зоны проводимости).

Рассмотрим водородоподобную примесь, помещенную в центре сферического полупроводникового микрокристалла A^3B^5 с бесконечно высокими стенками. Уравнение для определения примесных состояний в нем формально совпадает с уравнением Клейна-Гордона

$$(m^2 s^4 + s^2 \hat{p}^2) \Psi = \left(E + ms^2 + \frac{e^2}{\chi r} \right)^2 \Psi, \quad (1)$$

с граничным условием $\Psi(a) = 0$, где e – заряд электрона, χ – диэлектрическая проницаемость, E – энергия электрона, отсчитанная от дна зоны проводимости, a – радиус микрокристалла. После разделения переменных для радиальной волновой функции получим уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{L(L+1)}{r^2} \right) R(r) - \frac{\varepsilon}{ms^2} \frac{e^2}{\chi r} R(r) = \frac{\varepsilon^2 - m^2 s^4}{2ms^2} R(r), \quad (2)$$

с граничным условием $R(a) = 0$, где $\varepsilon = E + ms^2$, L – эффективное орбитальное квантовое число: $L = -1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 - \alpha^2}$, $l = 0, 1, \dots$, α – кейновский аналог постоянной тонкой структуры: $\alpha = e^2/\hbar s \chi$.

1. Исследуем область энергий $\varepsilon < ms^2$. Подставляя $\xi = \beta r$ с $\beta = \sqrt{-4(\varepsilon^2 - m^2 s^4)/s^2 \hbar^2}$ в уравнение (2), получим

$$\frac{d^2 R}{d\xi^2} + \frac{2}{\xi} \frac{dR}{d\xi} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{\xi} - \frac{L(L+1)}{\xi^2} \right) R = 0, \quad (3)$$

где $\lambda = 2e^2 \varepsilon / s^2 \hbar^2 \chi \beta$ и $R(\beta a) = 0$. Для радиальной функции получим

$$R(\xi) = e^{-\xi/2} \xi^L \Phi(L+1-\lambda, 2L+2, \xi), \quad (4)$$

где Φ – вырожденная гипергеометрическая функция. Значения параметра λ определим численно для каждого значения радиуса микрокристалла из граничного условия $R(\xi = \beta a) = 0$, которое эквивалентно уравнению

$$\Phi(L+1-\lambda, 2L+2, 2x/\sqrt{\lambda^2 + \alpha^2}) = 0, \quad (5)$$

где $x = a/a_B$, a_B – боровский радиус примеси ($a_B = \chi \hbar^2 / m e^2$), R_0 – эффективная постоянная Ридберга: $R_0 = m e^4 / 2 \hbar^2 \chi^2$. Для полной энергии системы, зависящей от радиуса, имеем

$$E = -ms^2 + \frac{2R_0 \lambda}{\alpha^2 \sqrt{\lambda^2 + \alpha^2}}. \quad (6)$$

2. Область энергий $\varepsilon > ms^2$. В этом случае величина β , переменная ξ и параметр λ чисто мнимы: $\beta = i\sqrt{4(\varepsilon^2 - m^2 s^4)/\hbar^2 s^2} = i\gamma$, $\gamma = \sqrt{4(\varepsilon^2 - m^2 s^4)/\hbar^2 s^2}$; $\xi = i\gamma r$ и $\lambda = -i\eta$, где $\eta = 2e^2 \varepsilon / s^2 \hbar^2 \gamma^2$.

Тогда радиальные функции представятся в виде

$$R(\xi) = e^{-\xi/2} \xi^L \Phi(L+1+i\eta, 2L+2, \xi). \quad (7)$$

Значения параметра η определим из граничного условия $R(\xi=i\eta)=0$, что дает

$$\Phi(L+1+i\eta, 2L+2, 2ix/\sqrt{\eta^2-\alpha^2})=0. \quad (8)$$

Для полной энергии в этом случае имеем выражение

$$E = -ms^2 + \frac{2R_0\eta}{\alpha^2\sqrt{\eta^2-\alpha^2}}. \quad (9)$$

В пределе $\alpha \rightarrow 0$ из (6) и (9) получим соответствующие выражения для энергетического спектра в параболическом полупроводниковом микрокристалле в двух различных областях энергии [5].

2. Обсуждение

На рис.1 приведены зависимости энергии E от радиуса микрокристалла для $1s$ ($n=1, L=0$), $2s$ ($n=2, L=0$) и $2p$ ($n=2, L=1$) состояний водородоподобной примеси в микрокристалле InSb ($m=0.016m_0$, m_0 — масса свободного электрона, $\chi=15$, $\alpha \approx 0.14$). Для $1s$ -состояния энергия микрокристалла становится положительной ($\varepsilon > ms^2$) при радиусах, меньших $1.733a_B$.

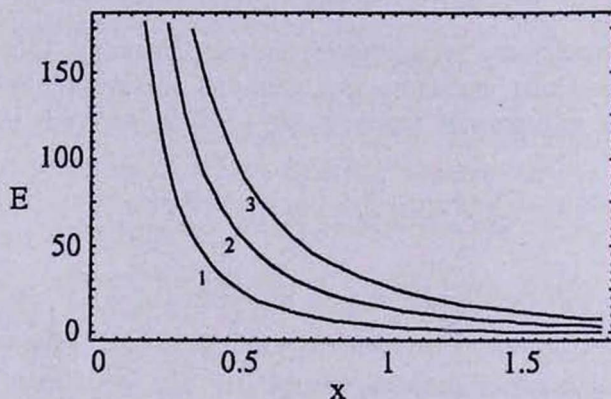


Рис.1. Зависимость полной энергии водородоподобной примеси от $x=a/a_B$ (в единицах $R_0 = me^4/2\hbar^2 \chi^2$) в полупроводниковом микрокристалле InSb ($\alpha = 0.14$) для 1) $1s$; 2) $1p$; 3) $2s$ -состояний.

В случае дисперсии Кейна полная энергия с уменьшением x растет медленнее, чем в случае стандартной дисперсии (см. рис.2). На рис.2 кривые 1 и 2 асимптотически приближаются к соответствующим значениям энергий в массивном образце.

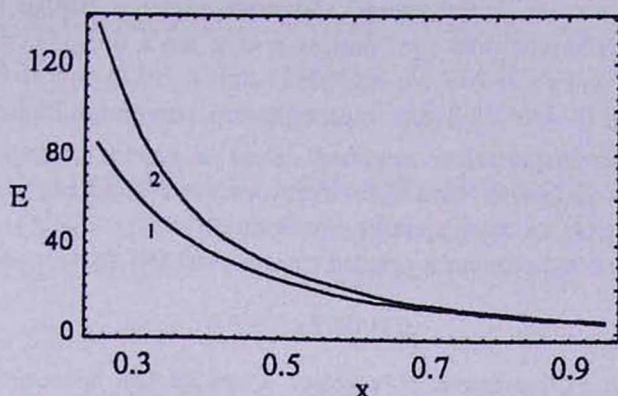


Рис.2. Зависимость энергии основного состояния $1s$ водородоподобной примеси от $x=a/a_B$ (в единицах R_0): 1) для непараболического ($\alpha=0.14$), 2) для параболического полупроводникового микрокристалла ($\alpha=0$).

Энергия связи основного состояния E_b водородоподобной примеси определяется как разность между энергией $E_{10} = -ms^2 + \frac{2R_0}{\alpha^2} \left(1 + \frac{\alpha^2 \tau_{10}^2}{x^2} \right)^{1/2}$ основного состояния без примеси и энергией $1s$ -состояния микрокристалла с примесью (τ_{10} – корень сферической функции Бесселя). На рис.3 представлены графики энергии связи для непараболического и стандартного полупроводникового микрокристалла.

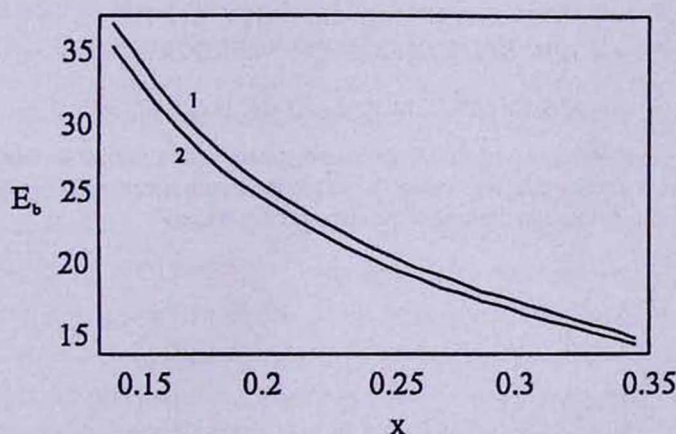


Рис.3. Зависимость энергии связи основного состояния водородоподобной примеси от $x=a/a_B$ (в единицах R_0): 1) для непараболического ($\alpha=0.14$), 2) для параболического полупроводникового микрокристалла ($\alpha=0$).

Вследствие "релятивизма", энергия связи в случае непараболического полупроводника при одном и том же x больше, чем в случае стандартного: $E_b = 34.2R_0$ ($E_0 = 179.8R_0$) при $x = 0.15$ ($a \approx 75 \text{ \AA}$) для InSb и $E'_b = 32.7R_0$ ($E' = 405.9R_0$) для стандартного микрокристалла. При всех радиусах микрокристалла энергия связи в случае непараболической дисперсии составляет большую часть полной энергии, чем в случае микрокристалла со стандартной дисперсией.

Работа выполнена в рамках программы INTAS по проекту 99-928.

ЛИТЕРАТУРА

1. D.Bimberg, M.Grundmann, N.Ledentsov. Quantum Dot heterostructures. Wiley, 1999.
2. P.Harrison. Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics. University of Leeds, Leeds, United Kingdom, 1999.
3. D.Bimberg, M.Grundmann, N.Ledentsov. MRS Bulletin, 23, 31 (1998).
4. Б.М.Аскеров. Электронные явления переноса в полупроводниках. М., Наука, 1985.
5. D.S.Chuu, C.M.Hsiao, and W.N.Mei. Phys. Rev. B, 46, 3898 (1992).

ՋՐԱԾԱՆՍԱՆ ԽԱՈՆՈՒՐԴԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐ A^3B^5 ՏԻՊԻ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ ՄԻԿՐՈՔՐԻՏՏՆԵՐՆԵՐԻՄ

Ա.Ա. ԱՎԵՏԻՍՅԱՆ, Է.Մ. ԴԱԶԱՐՅԱՆ, Հ.Ա. ՍԱՐԳՍՅԱՆ

Ուսումնասիրված են խառնուրդային մակարդակները մեղ արգելված գոտիով կիսահաղորդչային միկրոբյուրեղներում: Ցույց է տրված, որ միկրոբյուրեղի ցանկացած շառավիղների դեպքում լրիվ էներգիայի մեջ կապի էներգիայի ներդրումը ոչ պարաբոլական դիսպերսիայի դեպքում ավելի մեծ է, քան պարաբոլական:

HYDROGEN-LIKE IMPURITY STATES IN A^3B^5 SEMICONDUCTOR MICROCRYSTALS

A.A. AVETISYAN, E.M. KAZARYAN, H.A. SARKISYAN

The impurity levels in semiconductor microcrystals with a narrow forbidden bandgap are studied. It is shown that in the case of microcrystal with a nonparabolic dispersion the band energy is higher than in the case of the standard dispersion.