

УДК 621.315

ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ СО СЛАБО СПЛЮСНУТЫМ (ВЫТЯНУТЫМ) ЭЛЛИПТИЧЕСКИМ СЕЧЕНИЕМ

К.Г. ДВОЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 22 сентября 2000 г.)

В рамках теории возмущений исследованы уровни электрона в цилиндрической квантовой точке со слабо сплюснутым (вытянутым) эллиптическим сечением и получены аналитические выражения для уровней энергии. В случае микрокристалла из GaAs исследована зависимость энергии основного состояния от его линейных размеров и от коэффициента эллиптичности.

1. Введение

Одним из интенсивно развивающихся направлений физики твердого тела в настоящее время является изучение физических свойств полупроводниковых структур с пониженной размерностью [1]. Современные достижения полупроводниковых технологий допускают выращивание квантовых проволок (1D) и квантовых точек (0D) разных форм и размеров [2-4]. Особый интерес вызывают так называемые квантовые точки (микрокристаллы), в которых из-за квантованности движения носителей заряда во всех трех направлениях спектр энергии напоминает атомный [5,6], и поэтому такие полупроводниковые структуры называют искусственными атомами [6]. Известно, что в полупроводниках с пониженной размерностью важную роль играют как форма квантовой ямы [7], так и выбор ограничивающего потенциала на границе полупроводник-диэлектрик [8]. Были предложены различные модели ограничивающего потенциала квантовых ям: бесконечно глубокая яма [9], яма конечной глубины [10], параболическая яма [8,11,12] и т.д. Большинство теоретических и экспериментальных работ в этой области посвящено сферическим квантовым точкам (см., например, [9,11]). Однако в последние годы появилось много работ, где исследованы пирамидальные и цилиндрические микрокристаллы [7,13].

Самостоятельный интерес представляют цилиндрические квантовые точки. С геометрической точки зрения цилиндр обладает двумя

параметрами (радиус и высота), тогда как сфера обладает одним (радиус). С этой точки зрения актуальна попытка исследования цилиндрических квантовых точек, сечение которых отлично от кругового (в частности, эллиптическое), что по сути означает добавление еще одного геометрического параметра при решении задачи (параметр эллиптичности) [5,7].

В настоящей работе исследованы электронные состояния в цилиндрической квантовой точке со слабо сплюснутым (вытянутым) эллиптическим сечением.

2. Теория

Рассмотрим цилиндрический микрокристалл с бесконечными стенками со слабо сплюснутым (вытянутым) эллиптическим сечением. Предположим, что эллипс сечения, перпендикулярный к оси цилиндра, получается из окружности путем малой деформации без изменения площади сечения, что в свою очередь означает сохранение объема цилиндра. Тогда потенциальную энергию U можно представить в следующем виде:

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

где a и b — соответственно малая и большая полуоси эллипса, а c — высота цилиндра.

Гамильтониан запишется в виде

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \hat{P}^2 + U, \quad (2)$$

где $\hat{P}$ — оператор импульса, μ — эффективная масса электрона. После замены переменных

$$X = \frac{ax}{R}; Y = \frac{by}{R}; Z = z \quad (3)$$

получим цилиндр с круговым сечением радиуса R , который описывается уравнением $x^2 + y^2 = R^2$. Вводя параметр эллиптичности

$$\beta = \frac{b-a}{b} \quad (|\beta| \ll 1), \quad (4)$$

можем написать

$$a \approx R(1 + c_1\beta), \quad b \approx R(1 + c_2\beta), \quad (ab)^{1/2} = R. \quad (5)$$

Из условий (4) и (5) для коэффициентов разложения имеем $c_1 = -1/2$, $c_2 = 1/2$.

После вышеупомянутых преобразований для гамильтониана системы получим

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \hat{p}^2 + \frac{\beta}{2\mu} [\hat{p}_x^2 - \hat{p}_y^2] + U = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (6)$$

где $\hat{H}_0 = \frac{1}{2\mu} \hat{p}^2 + U$ — невозмущенная часть гамильтониана,

$\hat{V} = \frac{\beta}{2\mu} [\hat{p}_x^2 - \hat{p}_y^2]$ — малая поправка к нему, $\hat{p}$ — импульс частицы в новых переменных, а $\hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$ и $\hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$ — соответственно y - и z -компоненты оператора импульса.

Исходя из результатов работы [14], имеем

$$E_0 = \frac{\hbar^2 \alpha_{n,m}^2}{2\mu R^2} + \frac{\pi^2 \hbar^2 n_1^2}{2\mu c^2}, \quad (7)$$

где $\alpha_{n,m}$ — корни функции Бесселя, $n, n_1 = 1, 2, \dots$ и $m = 0, \pm 1, \dots$

Вычислим поправку к энергии основного состояния в первом порядке теории возмущений:

$$\Delta E = E - E_0 = \langle \Psi_0 | \hat{V} | \Psi_0 \rangle. \quad (8)$$

После несложных расчетов получим

$$\langle \Psi_0 | \hat{V} | \Psi_0 \rangle = 0. \quad (9)$$

Аналогичным образом, для поправки второго порядка с учетом условия (5) также получим нулевой результат. Таким образом, сохраняя лишь линейные по β члены в разложении (5), мы получили нулевую поправку к энергии основного состояния. Для того, чтобы поправка к энергии основного состояния была отлична от нуля, сохраним квадратичные по β члены в разложении (5), которое в этом случае примет вид

$$a \approx R(1 + c_1 \beta + c_{11} \beta^2), \quad b \approx R(1 + c_2 \beta + c_{22} \beta^2), \quad (10)$$

где коэффициенты, удовлетворяющие вышеупомянутым условиям, принимают следующие значения: $c_{11} = -1/8$, $c_{22} = 3/8$. После этих обозначений для гамильтониана системы имеем

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \hat{p}^2 + \frac{\beta}{2\mu} [\hat{p}_x^2 - \hat{p}_y^2] + \frac{\beta^2}{2\mu} \hat{p}_x^2 + U. \quad (11)$$

Выражение (11) можно записать в виде суммы

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} + \hat{V}', \quad (12)$$

где

$$\hat{V}' = \frac{\beta^2}{2\mu} \hat{p}_x^2. \quad (13)$$

Повторяя вышеизложенную процедуру, получим

$$\langle \Psi_0 | \hat{V}' | \Psi_0 \rangle = \beta^2 \frac{\hbar^2 \alpha_{n,m}^2}{4\mu R^2}, \quad (14)$$

после чего окончательно для энергии можем записать

$$E = \frac{\hbar^2 \alpha_{n,m}^2}{2\mu R^2} + \frac{\pi^2 \hbar^2 n_1^2}{2\mu c^2} + \beta^2 \frac{\hbar^2 \alpha_{n,m}^2}{4\mu R^2}. \quad (15)$$

3. Обсуждение

Как видно из полученных результатов, в линейном приближении поправка к энергии основного состояния равна нулю, что и следовало ожидать, т.к. эллипс сечения получается из окружности путем малой деформации без изменения ее площади, т.е. сжатием в одном направлении и вытягиванием в другом. Благодаря тому, что члены от этих преобразований входят в общий гамильтониан равносильным образом, но с противоположными знаками, то естественно, что они компенсируют друг друга. С другой стороны, вследствие сжатия уровень энергии повышается, а вследствие вытягивания понижается. В результате значение энергии остается без изменения. Картина меняется, когда учитываются квадратичные по β члены в разложении (10), вклад от среднего значения которых уже не нулевой.

Как видно из (15), эллиптичность проявляется при малых значениях радиуса, когда размерное квантование в радиальном направлении становится более существенным. С увеличением радиуса микрокристалла поправка к энергии уменьшается и в предельном случае приходим к результату, полученному в работе [14]. Так, например, при $R = 30 \text{ \AA}$ и $\beta = 0.2$ поправка составляет $\Delta E = 1,28 E_R$, а при $R = 75 \text{ \AA}$ и $\beta = 0.2$ она уже значительно меньше: $\Delta E = 0.2 E_R$, где $E_R = \hbar^2 / 2\mu a_B^2$ — эффективная ридберговская энергия, a_B — эффективный борковский радиус. В частности, для GaAs эти величины составляют $E_R = 5,275 \text{ мэВ}$, $a_B = 104 \text{ \AA}$. Следует отметить, что поправка к энергии основного состояния не зависит от знака β и всегда положительна.

С уменьшением высоты цилиндра картина повторяется, но уровни энергии смещены вверх, что является следствием увеличения вклада размерного квантования по направлению z в энергию основно-

го состояния. С другой стороны, с уменьшением c эллиптичность проявляется слабее. Это можно объяснить подавлением радиального квантования при малых значениях высоты цилиндра размерным квантованием по вертикали. В частности, при $c = 2a_B$ и $R = 0,5a_B$ разность энергий составляет $\Delta E = E_R$, а при $c = a_B$ имеем $\Delta E = 0,6E_R$.

ЛИТЕРАТУРА

1. "Self-Assembled InGaAs-GaAs Quantum Dots". New York, Academic Press, 1999.
2. P.Harrison. Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics. University of Leeds, Leeds, United Kingdom, 1999.
3. M.Grundmann, O.Stier, and D.Bimberg. Phys. Rev. B, 52, 11969 (1995).
4. P.Yu, W.Langbain, K.Leosson, and J.M. Hvam. Phys. Rev. B, 60, 16680 (1999).
5. K.Hirose and N.S.Wingreen. Phys. Rev. B, 59, 4604 (1999).
6. M.Bayer, O.Stern, P.Hawrylak, S.Fafard and A.Forchel. Nature, 405, 923 (2000).
7. D.G.Austing, S.Sasaki, S.Tarucha, S.M.Relmann, M.Koskinen, and M.Manninen. Phys. Rev. B, 60, R 11 514 (1999).
8. P. Maksym and T. Chakraborty. Phys. Rev. Lett., 65, 108 (1990).
9. D.Chuu, C.M.Hsiao, and W.N.Mei. Phys. Rev. B, 46, 3898 (1992).
10. А.С. Гаспарян, Э.М. Казарян. Известия НАН Армении, Физика, 32, 83 (1997).
11. E.M. Kazaryan, L.S. Petrosyan, and H.A. Sarkisyan. Physica E, 8, 19 (2000).
12. C.Boze and C.K.Sarkar. Physica B, 253, 238 (1998).
13. Q.Xie, A.Madhukar, P.Chen, and N.P.Kobayashi. Phys. Rev. Lett., 75, 2542 (1995).
14. J.W.Brown and H.N.Spector. J. Appl. Phys., 59, 1179 (1985).

ԷԼԵԿՏՐՈՆԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ ԹՈՒՅԼ ՍԵՂՄՎԱԾ (ԶԳՎԱԾ)
ԷԼԻՊՍԱՅԻՆ ՀԱՏՈՒՅԹՈՎ ԳԼԱՆԱՅԻՆ ԶՎԱՆՏԱՅԻՆ ԿԵՏՈՒՄ

Կ.Գ. ԴՎՈՅԱՆ

Խոտորումների տեսության շրջանակներում ուսումնասիրված են էլեկտրոնային վիճակները թույլ սեղմված (ձգված) էլիպսային հատույթով քվանտային կետում: GaAs քվանտային կետի համար ուսումնասիրված է հիմնական վիճակի էներգիայի կախվածությունը քվանտային կետի գծային չափերից և էլիպսայինության գործակցից:

ELECTRONIC STATES IN A CYLINDRICAL QUANTUM DOT WITH
A WEAKLY FLATTENED (ELONGATED) ELLIPTICAL CROSS-SECTION

K.G. DVOYAN

Within the framework of perturbation theory the electronic states in a cylindrical quantum dot with a weakly flattened (elongated) elliptical cross-section are investigated. For the GaAs quantum dot the ground state energy dependence on the dot's linear length and coefficient of ellipticity is studied.