Известия НАН Армении, Физика, т.36, №3, с.126-133 (2001)

УДК 621.315

ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ СО СЛАБО СПЛЮСНУТЫМ (ВЫТЯНУТЫМ) ЭЛЛИПТИЧЕСКИМ СЕЧЕНИЕМ ПРИ НАЛИЧИИ МАГНИТНОГО ПОЛЯ

К.Г. ДВОЯН, Э.М. КАЗАРЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 14 октября 2000 г.)

В рамках теории возмущений исследованы уровни электрона в цилиндрической квантовой точке со слабо сплюснутым (вытянутым) эллиптическим сечением при наличии однородного магнитного поля, направленного вдоль оси цилиндра. Для микрокристалла из GaAs исследованы зависимости энергии основного состояния от линейных размеров цилиндра, магнитного поля и коэффициента эллиптичности.

1. Введение

В последние годы все возрастает интерес к полупроводниковым структурам э пониженной размерностью, в которых движение носителей заряда квантовано в одном, в двух или в трех направлениях [1]. Современные технологии сделали реальным возможность выращивания таких объектов, как квантовые проволоки и квантовые точки (микрокристаллы; различных форм и размеров [2-6]. Вследствие размерного квантования физические свойства носителей заряда в вышеупомянутых структурах сильно зависят от внешней формы объекта. Большинство экспериментальных и теоретических работ в этой области посвящены сферическим микрокристаллам (см., напр., [6-8]). Вышесказанное справедливо и для квантовых проволок с круговым сечением [9,10]. Однако в ряде работ было показано, что малое изменение внешней формы микрокристалла (проволоки) сильно влияет на спектр и другие характеристики носителей заряда в таких полупроводниковых структурах [11,12]. Следует отметить, что помимо внешней формы объекта, имеет значение также выбор ограничивающего потенциала на границе полупроводник-диэлектрик. Среди предложенных моделей ограничивающего потенциала наиболее распространены следующие: бесконечно глубокая потенциальная яма [11], потенциальная яма конечной глубины [10,13], параболическая яма [8,14] и эллиптическая яма [15]. Правильным выбором ограничивающего потенциала на границе квантовой точки (проволоки) можно максимально приблизить задачу к реальной. Иными словами, в полупроводниковых структурах с пониженной размерностью возможно управление энергетическим спектром и другими физическими характеристиками носителей заряда с помощью изменения геометрических параметров и правильной аппроксимацией ограничивающего потенциала конкретно взятого образца.

Особый интерес представляют так называемые цилиндрические квантовые точки [9,16], которые представляют собой нечто среднее между квантовыми проволоками и дисками. Можно предположить, что свойства таких объектов при предельных переходах должны совпадать со свойствами квантовых проволок и квантовых дисков (пленок) [17]. С геометрической точки зрения цилиндр имеет преимущество над сферой и проволокой, обладая двумя параметрами (радиус и высота) вместо одного (радиуса) в случае последних. По этой же причине актуальна попытка рассмотрения случая с еще одним добавочным геометрическим параметром. Речь идет об исследовании физических свойств цилиндрических квантовых точек, сечение которых отлично от кругового – в частности, эллиптическое.

С другой стороны, современные технологии допускают получение в лабораторных условиях сильно квантующих магнитных полей порядка $B \sim 10^2$ Т, что, в свою очередь, открывает достаточно широкие возможности для управления энергетическим спектром и другими характеристиками (напр., временем релаксации) [18] в полупроводниках с пониженной размерностью с помощью магнитного квантования. При достаточно сильных полях магнитное квантование может преобладать над размерным и кулоновским квантованиями [7], что является серьезным фактором для изучения свойств размерно квантованных полупроводниковых систем при наличии внешнего магнитного поля (см. [7,9]).

В настоящей работе исследованы электронные состояния в цилиндрической квантовой точке со слабо сплюснутым (вытянутым) эллиптическим сечением при наличии внешнего однородного магнитного поля.

2. Теория

Рассмотрим непроницаемый цилиндрический микрокристалл со слабо сплюснутым (вытянутым) эллиптическим сечением в магнитном поле. 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 (см. рис.1). Тогда потенциальную энергию U можно представить в следующем виде:

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

где *а* и *b* – соответственно большая и малая полуоси эллипса сечения, а *с* – высота цилиндра.



Рис.1. Деформация кругового цилиндра в эллиптический.

Гамильтониан системы запишется в виде

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

где \hat{P} – оператор импульса частицы, \tilde{A} – вектор-потенциал поля, е и μ – соответственно заряд и эффективная масса электрона, s – скорость света.

Вектор-потенциал задачи выбран в следующей калибровке:

$$\widetilde{A}_{X} = \widetilde{A}_{Z} = 0, \ \widetilde{A}_{Y} = BX , \tag{3}$$

где В - величина магнитного поля.

После замены переменных

$$X = \frac{ax}{R}, \ Y = \frac{by}{R}, \ Z = z , \tag{4}$$

эллипс сечения превращается в круг радиуса R, который описывается уравнением $x^2 + y^2 = R^2$. Вводя параметр эллиптичности

$$\beta = \frac{b-a}{b}, \ \left|\beta\right| <<1, \tag{5}$$

можем написать

$$a \approx R(1+c_1\beta), \ b \approx R(1+c_2\beta), \ (ab)^{1/2} = R,$$
 (6)

где удовлетворяющие условиям (5) и (6) коэффициенты принимают значения $c_1 = -1/2$, $c_2 = 1/2$. После вышеупомянутых преобразований для гамильтониана системы получим

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \left(\hat{p} - \frac{e}{s} \mathbf{A} \right)^2 + \frac{\beta}{2\mu} \left[\hat{p}_x^2 - \hat{p}_y^2 + \frac{2e}{s} \mathbf{A} \hat{p} - \frac{e^2}{s^2} \mathbf{A}^2 \right] + U, \qquad (7)$$

где \hat{p} и A – соответственно импульс частицы и вектор-потенциал в новых переменных, а \hat{p}_x и \hat{p}_y – компоненты оператора импульса. Выражение для гамильтониана (7), в свою очередь, можно представить в виде суммы

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} , \qquad (8)$$

где

$$\hat{H}_{0} = \frac{1}{2\mu} \left(\hat{p} - \frac{e}{s} \mathbf{A} \right)^{2} + U, \qquad (9)$$

$$\hat{V} = \frac{\beta}{2\mu} \left[\hat{p}_x^2 - \hat{p}_y^2 + \frac{2e}{s} A \hat{p} - \frac{e^2}{s^2} A^2 \right].$$
 (10)

Решим невозмущенное уравнение Шредингера

$$\ddot{H}_0 \Psi_0 = E_0 \Psi_0. \tag{11}$$

В цилиндрических координатах вектор-потенциал имеет следующие компоненты:

$$A_r = A_z = 0, \quad A_{\varphi} = \frac{Br}{2}.$$
 (12)

Исходя из результатов, полученных в работе [9], можно написать

$$E_0 = \hbar \omega_H \left(n_r + \frac{|m| + m + 1}{2} \right) + \frac{\pi^2 \hbar^2 n_1^2}{2\mu c^2}, \qquad (13)$$

где $\omega_H = eB/\mu s$ – циклотронная частота, n_r – нецелочисленный аналог радиального квантового числа, m = 0, 1... и $n_1 = 1, 2...$

Далее в первом порядке теории возмущений введем величину

$$\Delta E = E - E_0 = \langle \Psi_0 | \hat{\mathcal{V}} | \Psi_0 \rangle. \tag{14}$$

После некоторых вычислений получим

$$<\Psi_{0}\left|\hat{\mathcal{V}}\right|\Psi_{0}>=\frac{5}{2}\beta\hbar\omega_{H}m-\frac{\beta}{4}\hbar\omega_{H}I(t). \tag{15}$$

Окончательно для энергии имеем

$$E = \hbar \omega_H \left(n_r + \frac{|m| + m + 1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 \pi^2 n_1^2}{2\mu c^2} + \frac{5}{2} \beta \hbar \omega_H m - \frac{\beta}{4} \hbar \omega_H I(t), \quad (16)$$

где введены обозначения

$$I(t) = \frac{\int_{0}^{t} e^{-\xi} \xi^{|m|+1} F^{2}[-n_{r},|m|+1,\xi] d\xi}{\int_{0}^{t} e^{-\xi} \xi^{|m|} F^{2}[-n_{r},|m|+1,\xi] d\xi},$$
(17)

$$a_H = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega_H}}, \quad \xi = \frac{\mu\omega_H}{2\hbar}r^2, \quad t = \frac{R^2}{2a_H^2}.$$
 (18)

3. Обсуждение

Из полученных результатов видно, что в отличие от случая, когда магнитное поле отсутствует [16], поправка к энергии основного состояния отлична от нуля уже тогда, когда сохранены только линейные по β члены в разложении (6). Иначе говоря, при наличии магнитного поля эллиптичность сечения цилиндрической квантовой точки проявляется ярче. При деформации (см. рис.1) круговое сечение в одном направлении вытягивается, а в другом сжимается (площадь сечения сохраняется). Вытягивание приводит к повышению уровней энергии, а сжатие – к понижению. При отсутствии магнитного поля, когда учитывались лишь линейные по β члены в разложении (6), вследствие этих преобразований энергия основного состояния оставалась без изменений [16].

Наличие поля приводит к появлению в гамильтониане интерференционных членов от вышеупомянутых преобразований, которые и дают вклад в энергию основного состояния в линейном по β приближении.

На рис.2 показаны зависимости энергии основного состояния круговой и эллиптической цилиндрических квантовых точек от приведенного радиуса при различных значениях магнитного поля. Отметим, что нижеприведенные зависимости получены для микрокристалла из GaAs ($E_R = 5.275$ meV, $a_B = 104$ Å). Как видно из рисунка, при малых значениях радиуса кривые сливаются и получается результат работы [16], что является следствием подавления вклада магнитного квантования в энергию основного состояния радиальным размерным квантованием.

С увеличением радиуса энергия уменьшается, и кривые, соответствующие круговой и эллиптической квантовым точкам, отделяются лишь малой поправкой. Это можно объяснить тем, что при больших радиусах магнитное квантование становится значительно большим по сравнению с размерным квантованием, и интерференционный член проявляется в виде малой поправки. При больших значениях поля картина повторяется с той лишь разницей, что кривые смещены вверх и эллиптическая поправка становится сравнительно большой (кривая 1).

AR REYN APMANOUS



Рис.2. Зависимость энергии основного состояния круговой и эллиптической цилиндрических квантовых точек от приведенного радиуса при c = 50Å. 1 - B = 20 T, 2 - B = 10 T.

Зависимость энергии основного состояния от высоты цилиндра при фиксированном значении магнитного поля показана на рис.3. Как видно из рисунка, с уменьшением *c* вертикальное размерное квантование превалирует над радиальным и магнитным квантованиями и в результате кривые энергии основного состояния эллиптического и кругового случаев сливаются. С увеличением высоты цилиндра энергия уменьшается и эллиптичность проявляет себя как малое возмущение. В частности, при $c = 1,5a_B$ разность энергий составляет $\Delta E \approx 0,12E_R$, а при $c = 2a_B$ имеем $\Delta E \approx 0,14E_R$. Здесь и выше для коэффициента эллиптич-



Рис.3. Зависимость энергии основного состояния кругового и эллиптического цилиндрических микрокристаллов от высоты цилиндра при $R = 1,5a_B, B = 20$ Т.

ности имеем $\beta = 0,1$, от значения которого тоже зависит величина поправки. При меньших значениях β поправка получается меньше. В частности, при $\beta = 0$ получается результат работы [9].



Рис.4. Зависимость энергии основного состояния кругового и эллиптического цилиндрических микрокристаллов от магнитного поля при различных значениях высоты и приведенного радиуса цилиндра. $1 - c = a_B$, $R = a_B$, $2 - c = a_B$, $R = 1,5a_B$, $3 - c = 2a_B$, $R = a_B$, $4 - c = 2a_B$, $R = 1,5a_B$.

Наконец, на рис.4 приведена зависимость энергии основного состояния от величины магнитного поля. Из рисунка видно, что при малых значениях поля вследствие конкуренции размерного и магнитного квантований и преобладания первого эллиптичность не проявляется, и получается результат работы [16]. С увеличением поля эллиптичность проявляется в виде малой поправки. При сравнении зависимостей видно (напр., кривые 1,2), что кривая энергии для большего значения приведенного радиуса с увеличением магнитного поля растет быстрее. Это является следствием того, что при больших радиусах энергия в основном обусловлена магнитным квантованием. Из сравнения кривых 1 и 2 (3 и 4) видно, что эллиптичность проявляется сильнее в последнем случае, что является следствием того, что в гамильтониане поправка входит как интерференционный член от магнитного поля.

ЛИТЕРАТУРА

- P.Harrison. Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics. University of Leeds, Leeds, United Kingdom, 1999.
- Self-Assembled InGaAs-GaAs Quantum Dots. New York, Academic Press, 1999, Semiconductors and semimetals, vol.60.
- 3. M.Grund nann, O.Stier, and D.Bimberg. Phys. Rev. B, 52, 11969 (1995).
- 4. Q.Xie, A.Madhukar, P.Chen, and N.P.Kobayashi. Phys. Rev. Lett., 75, 2542 (1995).
- 5. M.Califano and P.Harrison. J. Appl. Phys., 86, 5054 (1999).

- 6. C.Boze and C.K.Sarkar. Physica B, 253, 238 (1998).
- 7. Zh.Xiao, J.Zhu, and F.He. J. Appl. Phys., 79, 9181 (1996).
- 8. E.M.Kazaryan, L.S.Petrosyan, and H.A.Sarkisyan. Physica E, 8, 19 (2000).
- 9. S.V.Branis, G.Li, and K.K.Bajaj. Phys. Rev. B, 47, 1316 (1992).
- 10. J.W.Brown and H.N.Spector. J. Appl. Phys., 59, 1179 (1985).
- 11. А.С.Гаспарян, Э.М.Казарян. Известия НАН Армении, Физика, 32, 130 (1997).
- 12. K.G.Dvoyan and E.M.Kazaryan. Phys. Stat. Sol. (b), (в печати).
- 13. D.Chuu, C.M.Hsiao, and W.N.Mei. Phys. Rev. B, 46, 3898 (1992).
- 14. P.Maksym and T.Chakraborty. Phys. Rev. Lett., 65, 108 (1990).
- 15. L.Serra, A.Puente, and E.Lipparini. Phys. Rev. B, 60, R13966 (1999).
- 16. К.Г.Двоян. Изв. НАН Армении, Физика, 36, 27 (2001).
- 17. Y.Zhang and A.Mascarenhas. Phys. Rev. B, 59, 2040 (1999).
- M.M.Aghasyan, S.M.Badalyan, G.W.Bryant. Second Euroconference on Nanoscience for Nanotechnology. Antwerpen, Belgium, 1999, p.56.

ԷԼԵԿՏՐՈՆԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ ԹՈՒՅԼ ՍԵՂՄՎԱԾ (ՋԳՎԱԾ) ԷԼԻՊՍԱՅԻՆ ՀԱՏՈւՅԹՈՎ ԳԼԱՆԱՅԻՆ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԿԵՏՈւՄ ՄԱԳՆԻՍԱԿԱՆ ԴԱՇՏԻ ԱՌԿԱՅՈՒԹՅԱՄԲ

Կ.Գ. ԴՎՈՅՄՆ, Է.Մ. ՂԱԶԱՐՅՄՆ

Խոտորումների տեսության շրջանակներում ուսումնասիրված են էլեկտրոնային վիճակները թույլ սեղմված (ձգված) էլիպսային հատույթով գլանային քվանտային կետում գլանի առանցքով ուղղված մագնիսական դաշտում։ GaAs քվանտային կետի համար ուսումնասիրված է հիմնական վիճակի էներգիայի կախվածությունը քվանտային կետի գծային չափերից, մագնիսական դաշտից և էլիպսայինության գործակցից։

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

K.G. DVOYAN, E.M. KAZARYAN

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