Известия НАН Армении, Физика, т.36, №6, с.346-354 (2001)

УДК 621.315

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

К.Г. ДВОЯН, Э.М. КАЗАРЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 25 января 2001 г.)

Вариационным методом в рамках теории возмущений исследованы примесные состояния и энергия связи электрона в цилиндрической квантовой точке со слабо сплюснутым (вытянутым) эллиптическим сечением. Полученные результаты сравнены со случаем цилиндра с круговым сечением. В случае микрокристалла из GaAs исследованы зависимости энергии основного состояния и энергии связи от его линейных размеров и от коэффициента эллиптичности.

1. Введение

Современный прогресс нанотехнологий дает возможность выращивания новых типов полупроводниковых гетероструктур, чьи размеры (несколько нанометров) соизмеримы с длиной де Бройлевской волны носителей заряда в них. Вследствие этого размерное квантование стало заметным образом влиять на движение электронов и дырок в одном (квантовая пленка, сверхрешетка), в двух (квантовая проволока) и в трех (квантовая точка) направлениях. В последние годы заметно возрос интерес к нульмерным (0D) полупроводниковым наноструктурам [1]. Это обстоятельство в основном связано с нелинейными оптическими свойствами таких объектов, а также реализацией высокоэффективных лазеров на квантовых точках. Еще недавно такие структуры выращивались в коллоидных растворах или в стеклянных диэлектрических матрицах. Однако развитие полупроводниковых технологий, таких, как молекулярно-лучевая эпитаксия или литографическая техника, сделало реальным выращивание квантовых точек в $GaAsAl_{1-x}As$ или в схожих структурах [2]. В настоящее время хорошо исследованы свойства сферических микрокристаллов (см., напр., [3]). Вместе с тем, в последние годы, основываясь на методе роста Странски-Крастанова, появилось много работ, посвященных пирамидальным и цилиндрическим микрокристаллам [4,5]. Вследствие этого важное значение приобрел вопрос правильной аппроксимации ограничивающего потенциала квантовой точки. Отметим к примеру, что именно верная аппроксимация ограничивающего потенциала определенного класса квантовых ям сделала возможным теоретическое обобщение теоремы Кона в них [6].

С другой стороны, немаловажную роль играет и внешняя форма микрокристалла, которая тоже влияет на физические характеристики носителей заряда. В работах [5,7] исследованы свойства цилиндрических микрокристаллов с круговым сечением. Эффект влияния эллиптичности сечения на одноэлектронные состояния рассмотрен в работе [8]. В работе [9] показано, что слабая эллипсоидальная деформация сферического микрокристалла ощутимым образом влияет и на примесные состояния. Поэтому представляется актуальной задача исследования примесных состояний в цилиндрической квантовой точке со слабо сплюснутым (вытянутым) эллиптическим сечением. Решению этой задачи и посвящена данная работа.

2. Теория

Рассмотрим цилиндрический микрокристалл со слабо сплюснутым (вытянутым) эллиптическим сечением. Считаем, что эллипс сечения получается из круга путем малой деформации без изменения площади сечения, что в свою очередь означает сохранение объема микрокристалла (см. рис.1). Тогда потенциальная энергия $U(X,Y,Z)$ запишется в виде

$$U(X,Y,Z)=\begin{cases}0, & \dfrac{X^2}{a^2}+\dfrac{Y^2}{b^2}<1, \quad |z|<L,\\ \infty, & \dfrac{X^2}{a^2}+\dfrac{Y^2}{b^2}\geq 1, \quad |z|\geq L,\end{cases} \tag{1}$$

где a и b, соответственно, малая и большая полуоси эллипса сечения, $2L$ – высота цилиндра. Отметим, что примесь расположена в геометрическом центре квантовой ямы.

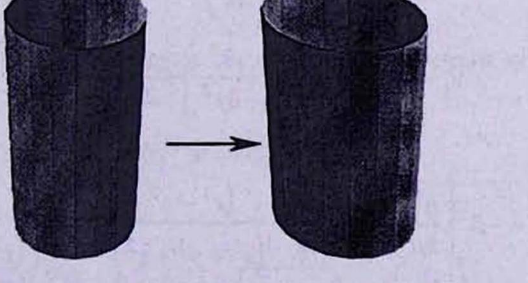

Рис.1. Деформация кругового цилиндра в эллиптический.

Гамильтониан задачи имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{\chi\sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2}} + U\ , \tag{2}$$

где $\hat{P}$ – оператор импульса частицы, μ и e – соответственно, эффективная масса и заряд электрона, χ – диэлектрическая проницаемость полупроводника и окружающей среды (в частности для GaAs $\chi = 12{,}5$).

После замены переменных

$$X = \frac{ax}{R_0};\ Y = \frac{by}{R_0};\ Z = z\ , \tag{3}$$

получим цилиндр с круговым сечением радиуса R_0. Введя параметр эллиптичности

$$\beta = \frac{b-a}{b}\ \left(|\beta| << 1\right), \tag{4}$$

можем написать

$$a \approx R_0\left(1 + c_1\beta + c_3\beta^2\right),\ b \approx R_0\left(1 + c_2\beta + c_4\beta^2\right),\ R_0 = (ab)^{1/2}, \tag{5}$$

где коэффициенты, удовлетворяющие вышеупомянутым условиям, принимают следующие значения: $c_1 = -1/2$, $c_2 = 1/2$, $c_3 = -1/8$, $c_4 = 3/8$. После такого преобразования гамильтониан системы можно записать как

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 + \hat{V}_1 + \hat{V}_2 \tag{6}$$

где

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + U\ , \tag{7}$$

$$\hat{H}_1 = -\frac{\alpha}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}, \tag{8}$$

$$\hat{V}_1 = -\beta\left[\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \frac{\alpha}{2}\cdot\frac{x^2 - y^2}{\left(x^2 + y^2 + z^2\right)^{3/2}}\right], \tag{9}$$

$$\hat{V}_2 = -\beta^2\left[\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{3\alpha^2}{8}\cdot\frac{\left(x^2 - y^2\right)^2}{\left(x^2 + y^2 + z^2\right)^{5/2}} - \frac{\alpha}{2}\cdot\frac{y^2}{\left(x^2 + y^2 + z^2\right)^{3/2}}\right]. \tag{10}$$

и введено обозначение $\alpha = e^2/\chi$. Отметим, что $\hat{H}_0$ и $\hat{H}_1$ имеют одинаковый вклад в общий гамильтониан, а $\hat{V}_1$ и $\hat{V}_2$ в силу условия $|\beta| << 1$ можно рассматривать как малые возмущения.

В качестве первого шага решим уравнение Шредингера в цилиндрических координатах

$$\hat{H}_0\Psi_0 = E_0\Psi_0, \tag{11}$$

которое в безразмерных величинах запишется в виде

$$-\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\Psi_0 = \varepsilon_0\Psi_0, \tag{12}$$

Здесь введены обозначения $\varepsilon_0 = E_0/E_R$, $r=\rho/a_B$, $z=Z/a_B$, где $E_R = \hbar^2/2\mu a_B^2$ – эффективная ридберговская энергия, a_B – эффективный боровский радиус (для GaAs $E_R = 5.275$ meV, $a_B = 104$ Å). Исходя из результатов работы [7], волновую функцию запишем в виде

$$\Psi_0 = N_0 e^{im\varphi}\cos(kz)J_m(\eta r), \tag{13}$$

где N_0 – нормировочный коэффициент, $J_m(\eta r)$ – функция Бесселя m-ого порядка и $\eta^2 = \varepsilon_0^2 - k^2$, $k=\pi/2L'$ – волновой вектор в направлении z, а $L' = L/a_B$.

Энергетические уровни выражаются через нули $\alpha_{n,m}$ функции Бесселя,

$$\varepsilon_0 = \frac{\alpha_{n,m}^2}{R_0'^2}+\frac{\pi^2}{4L'^2}, \tag{14}$$

где $n=1,2...$; $m=0,\pm1,\pm2...$, $R_0' = R_0/a_B$.

Далее, следуя вариационному методу, решим уравнение

$$\left(\hat{H}_0+\hat{H}_1\right)\Psi_1 = \varepsilon_{imp}^{circle}\Psi_1, \tag{15}$$

где $\varepsilon_{imp}^{circle}$ – энергия примесного электрона в цилиндре с круговым сечением. Решение этого уравнения для основного состояния $(n=1,\ m=0,\ n_1=1)$ представим в виде

$$\Psi_1^{(0)} = N_1 J_0\left(\frac{\alpha_{1,0}}{a_B}r\right)\cos\left(\frac{\pi z}{2L'}\right)\exp\left(-\lambda\sqrt{r^2+z^2}\right), \tag{16}$$

где λ – вариационный параметр, а N_1 – нормировочный коэффициент, определяемый как

$$N_1^{-2} = 2\pi a_B^3 A, \tag{17}$$

где

$$A = \int_0^{R_0'}\int_{-L'}^{L'} J_0^2\left(\frac{\alpha_{1,0}}{a_B}r\right)\exp\left(-2\lambda\sqrt{r^2+z^2}\right)\cos^2\left(\frac{\pi z}{2L'}\right) r\,dr\,dz. \tag{18}$$

После некоторых преобразований для энергии получим

$$\varepsilon_{imp}^{circle} = <\Psi_1^{(0)}\left|\hat{H}_0+\hat{H}_1\right|\Psi_1^{(0)}> = \varepsilon_0 - \lambda^2 + \frac{B_1+B_2+B_3}{A}, \tag{19}$$

где введены обозначения

$$B_1 = (2\lambda-2)\int_0^{R_0'}\int_{-L'}^{L'} J_0^2\left(\frac{\alpha_{1,0}}{a_B}r\right)\exp\left(-2\lambda\sqrt{r^2+z^2}\right)\cos^2\left(\frac{\pi z}{2L'}\right)\frac{rdrdz}{\sqrt{r^2+z^2}}, \tag{20}$$

$$B_2 = -2\lambda\frac{\alpha_{1,0}}{a_B}\int_0^{R_0'}\int_{-L'}^{L'} J_0\left(\frac{\alpha_{1,0}}{a_B}r\right)J_1\left(\frac{\alpha_{1,0}}{a_B}r\right)\exp\left(-2\lambda\sqrt{r^2+z^2}\right)\cos^2\left(\frac{\pi z}{2L'}\right)\frac{r^2drdz}{\sqrt{r^2+z^2}}, \tag{21}$$

$$B_3 = -2\lambda\frac{\pi}{2L'}\int_0^{R_0'}\int_{-L'}^{L'} J_0^2\left(\frac{\alpha_{1,0}}{a_B}r\right)\exp\left(-2\lambda\sqrt{r^2+z^2}\right)\cos\left(\frac{\pi z}{2L'}\right)\sin\left(\frac{\pi z}{2L'}\right)\frac{rdrzdz}{\sqrt{r^2+z^2}}. \tag{22}$$

Следуя первому порядку теории возмущений, введем величину

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon_{imp}^{el} - \varepsilon_{imp}^{circle} = <\Psi_1^{(0)}\left|\hat{V}_1+\hat{V}_2\right|\Psi_1^{(0)}>, \tag{23}$$

где ε_{imp}^{el} – энергия примесного электрона в эллиптическом цилиндре.

Нетрудно убедиться, что

$$<\Psi_1^{(0)}\left|\hat{V}_1\right|\Psi_1^{(0)}> \equiv 0. \tag{24}$$

Аналогичным образом, вычисляя вклад от $\hat{V}_1$ во втором порядке теории возмущений, также получим нулевой результат:

$$\varepsilon_{imp_n}^{el(2)} = \sum_k \frac{\left|\hat{V}_{1_{kn}}\right|^2}{\varepsilon_{imp_n}^{el(0)} - \varepsilon_{imp_k}^{el(0)}} \equiv 0. \tag{25}$$

Этого и следовало ожидать, т.к. физический результат не должен зависеть от того, в каком направлении вытянут эллипсоид, т.е. от знака β. Чтобы найти ненулевой вклад от поправки в энергию основного состояния, вычислим вклад от $\hat{V}_2$, который пропорционален β^2. После некоторых вычислений окончательно для энергии получим

$$\varepsilon_{imp}^{el} = \varepsilon_{imp}^{circle} + <\Psi_1^{(0)}\left|\hat{V}_2\right|\Psi_1^{(0)}> =$$

$$= \varepsilon_{imp}^{circle} + \beta^2\left(\frac{\alpha_{1,0}^2}{2R'^2} + \frac{D_1+D_2+D_3+D_4+D_5+D_6}{A}\right), \tag{26}$$

где через D_i $(i=1,..6)$ обозначены следующие интегральные величины:

$$D_1 = \int_0^{R_0'}\int_{-L'}^{L'} J_0^2\left(\frac{\alpha_{1,0}}{a_B}r\right)\exp\left(-2\lambda\sqrt{r^2+z^2}\right)\cos^2\left(\frac{\pi z}{2L'}\right)\frac{rdrdz}{\sqrt{r^2+z^2}}, \tag{27}$$

$$D_2 = \frac{\lambda^2}{2}\int_0^{R_0'}\int_{-L'}^{L'} J_0^2\left(\frac{\alpha_{1,0}}{a_B}r\right)\exp\left(-2\lambda\sqrt{r^2+z^2}\right)\cos^2\left(\frac{\pi z}{2L'}\right)\frac{rdrz^2dz}{r^2+z^2}, \quad (28)$$

$$D_3 = \left(\frac{1}{2}-\frac{\lambda}{2}\right)\int_0^{R_0'}\int_{-L'}^{L'} J_0^2\left(\frac{\alpha_{1,0}}{a_B}r\right)\exp\left(-2\lambda\sqrt{r^2+z^2}\right)\cos^2\left(\frac{\pi z}{2L'}\right)\frac{r^3drdz}{\left(r^2+z^2\right)^{3/2}}, \quad (29)$$

$$D_4 = \frac{\pi\lambda}{2L'}\int_0^{R_0'}\int_{-L'}^{L'} J_0^2\left(\frac{\alpha_{1,0}}{a_B}r\right)\exp\left(-2\lambda\sqrt{r^2+z^2}\right)\cos\left(\frac{\pi z}{2L'}\right)\sin\left(\frac{\pi z}{2L'}\right)\frac{rdrzdz}{\sqrt{r^2+z^2}}, \quad (30)$$

$$D_5 = -\frac{3}{8}\int_0^{R_0'}\int_{-L'}^{L'} J_0^2\left(\frac{\alpha_{1,0}}{a_B}r\right)\exp\left(-2\lambda\sqrt{r^2+z^2}\right)\cos^2\left(\frac{\pi z}{2L'}\right)\frac{r^5drdz}{\left(r^2+z^2\right)^{5/2}}, \quad (31)$$

$$D_6 = -\frac{3}{8}\int_0^{R_0'}\int_{-L'}^{L'} J_0^2\left(\frac{\alpha_{1,0}}{a_B}r\right)\exp\left(-2\lambda\sqrt{r^2+z^2}\right)\cos^2\left(\frac{\pi z}{2L'}\right)\frac{r^5drdz}{\left(r^2+z^2\right)^{5/2}}. \quad (32)$$

Энергия связи определяется как разность энергий без примеси и с примесью. Пользуясь результатами, полученными в работе [8], для нее получим

$$\varepsilon_{bind}^{el} = \frac{\alpha_{1,0}^2}{R_0'^2} + \frac{\pi^2}{4L'^2} + \beta^2\frac{\alpha_{1,0}^2}{2R_0'^2} - \varepsilon_{imp}^{el}. \quad (33)$$

3. Обсуждение

Как видно из полученных результатов, наличие примесного центра в линейном по β приближении не дает вклада в энергию основного состояния. Как было показано в работе [8], при отсутствии примесного центра ситуация была аналогичной. Наличие примеси добавляет в гамильтониане кулоновский потенциал, который в силу своего притягательного характера лишь уменьшает влияние эллиптичности сечения. Иными словами, наложение центрально-симметричного поля в радиальном направлении заставляет частицу меньше ощущать эллиптичность стенок. Что касается вклада самих стенок, то, как показано в работе [8], вклад от деформации в первом порядке по β нулевой. Это объясняется тем, что деформация кругового сечения приводит к сжатию в одном геометрическом направлении и вытягиванию в другом. Вследствие сжатия уровень энергии повышается ровно настолько, насколько понижается при вытягивании в перпендикулярном направлении. Вклады от этих преобразований компенсируют друг друга, и в итоге энергия в первом приближении остается без изменений. Что касается кулоновского потенциала, то он в этом случае ничего не меняет. Картина становится иной, когда учитываются квадратичные по β члены в разложении (5), вклад от которых в энергию основного состояния уже не нулевой.

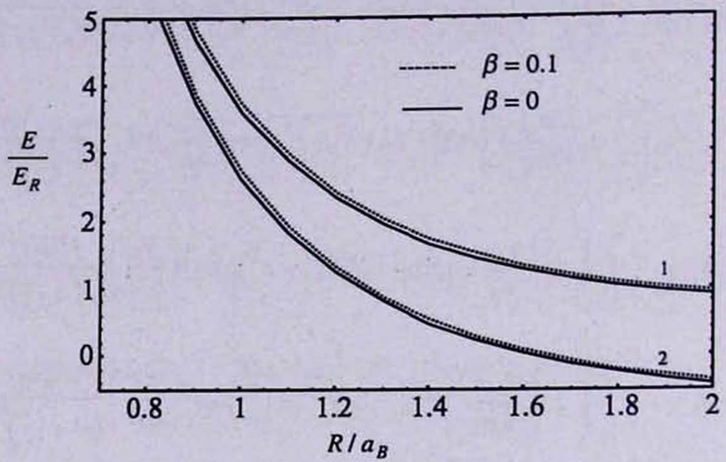

Рис.2. Зависимость энергии основного состояния примесного электрона в эллиптической и круговой цилиндрических квантовых точках от приведенного радиуса. 1. $L = 100$ Å, 2. $L = 200$ Å.

На рис.2 приведены зависимости энергии примесного электрона в эллиптической и круговой цилиндрических квантовых точках от приведенного радиуса при различных значениях его высоты. Как видно из рисунка, эллиптичность проявляется при малых значениях радиуса. С увеличением радиуса энергия уменьшается, и кривые кругового и эллиптического случаев сливаются. Это объясняется тем, что при малых радиусах размерное квантование в радиальном направлении подавляет кулоновское и перпендикулярное размерное квантования. При больших радиусах энергия частицы в радиальном направлении в основном обусловлена кулоновским квантованием и роль эллиптичности становится незначительной. Для больших значений высоты кривые энергии смещены вниз, что является следствием уменьшения размерного квантования по вертикали.

На рис.3 приведены кривые энергии основного состояния примесного электрона в эллиптической и круговой цилиндрических квантовых точках от высоты цилиндра при различных значениях приведенного радиуса. Как видно из рисунка (кривая 2), эллиптичность сечения проявляется ярче при больших значениях высоты. С уменьшением высоты микрокристалла размерное квантование по вертикали становится значительнее, вследствие чего эллиптичность проявляется слабее и кривые сливаются. Ситуация аналогична и для меньших значений радиуса (кривая 1), но кривые смещены вверх благодаря увеличению вклада размерного квантования в радиальном направлении. Следует отметить также, что при меньших значениях радиуса эллиптическая поправка заметнее. Так например при $R = 100$ Å поправка составляет $\Delta E \approx 0{,}15 E_R$, а при $R = 150$ Å она составляет уже $\Delta E \approx 0{,}07 E_R$.

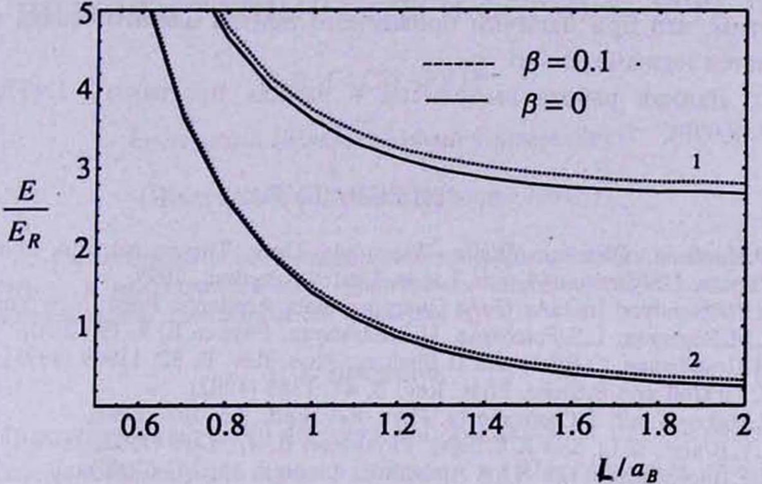

Рис.3. Зависимость энергии основного состояния примесного электрона в эллиптической и круговой цилиндрических квантовых точках от высоты цилиндра. 1. $R = 100$ Å, 2. $R = 150$ Å.

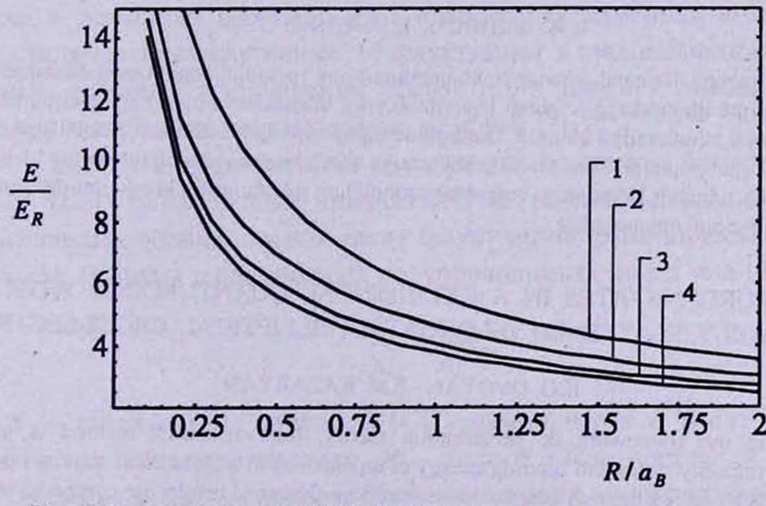

Рис.4. Зависимость энергии связи цилиндрического микрокристалла с эллиптическим сечением от приведенного радиуса. 1. $L = 50$ Å, 2. $L = 100$ Å, 3. $L = 150$ Å, 4. $L = 200$ Å

На рис.4 приведены зависимости энергии связи примесного электрона в цилиндрическом микрокристалле с эллиптическим сечением от приведенного радиуса при различных значениях его высоты. Как и следовало ожидать, энергия связи с ростом L уменьшается. Для больших значений радиуса кривые смещены вниз. В частности отметим, что разница энергий связи для различных L с увеличением высоты уменьшается.

Сравнивая полученные результаты с результатами работы [8], отметим, что при наличии примесного центра эллиптическая поправка меняется незначительно.

Данная работа выполнена в рамках программы INTAS (грант №99-00928).

ЛИТЕРАТУРА

1. **P.Harrison**. Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics. University of Leeds, Leeds, United Kingdom, 1999.
2. Self-Assembled InGaAs-GaAs Quantum Dots. Academic Press, New York, 1999.
3. **E.M.Kazaryan, L.S.Petrosyan, H.A.Sarkisyan**. Physica E, **8**, 19 (2000).
4. **M.Grundmann, O.Stier,** and **D.Bimberg**. Phys. Rev. B, **52**, 11969 (1995).
5. **S. Le Goff and B.Stebe**. Phys. Rev. B, **47**, 1383 (1992).
6. **P.Maksym and, T.Chakraborty**. Phys. Rev. Lett., **65**, 108 (1990).
7. **S.V.Branis, G.Li,** and **K.K.Bajaj**. Phys. Rev. B, **47**, 1316 (1992).
8. **К.Г.Двоян**. Известия НАН Армении, Физика, **35**, 242 (2000).
9. **А.С.Гаспарян, Э.М.Казарян**. Известия НАН Армении, Физика, **32**, 130 (1997).

ԽԱՌՆՈՒՐԴԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ ԹՈՒՅԼ ՍԵՂՄՎԱԾ (ՁԳՎԱԾ) ԷԼԻՊՍԱՅԻՆ ՀԱՏՈՒՅԹՈՎ ԳԼԱՆԱՅԻՆ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԿԵՏՈՒՄ

Կ.Գ. ԴՎՈՅԱՆ, Է.Մ. ՂԱԶԱՐՅԱՆ

Վարիացիոն մեթոդով, խոտորումների տեսության շրջանակներում ուսումնասիրված են խառնուրդային վիճակները և կապի էներգիան թույլ սեղմված (ձգված) էլիպսային հատույթով գլանային քվանտային կետում: Ստացված արդյունքները համեմատված են շրջանային հատույթով գլանի դեպքի հետ: GaAs քվանտային կետի համար ուսումնասիրված են հիմնական վիճակի և կապի էներգիայի կախվածությունները քվանտային կետի գծային չափերից և էլիպսայնության գործակցից:

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

K.G. DVOYAN, E.M. KAZARYAN

Within the framework of perturbation theory, the variational method is used to determine impurity states and binding energy of an electron in a cylindrical quantum dot with a weakly flattened (elongated) elliptical cross-section. Obtained results are compared with the case of a circular cylinder. For a GaAs quantum dot the ground state and binding energy dependences on the dot's linear length and coefficient of ellipticity are studied.