

УДК 621.315

ВЛИЯНИЕ ГРАНИЦЫ ПЕРЕХОДА ПОЛУПРОВОДНИК-ДИЭЛЕКТРИК НА ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В СФЕРИЧЕСКИХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

Э.М. КАЗАРЯН, Л.С. ПЕТРОСЯН, А.А. САРКИСЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 14 ноября 2001 г.)

В работе исследованы электронные состояния в сферических квантовых точках с учетом граничных условий. Выявлен пороговый характер появления энергетических уровней электрона внутри квантовых точек. Изучены зависимости энергии электрона от радиуса квантовых точек и высоты ограничивающего потенциала.

1. Введение

Современные возможности нанотехнологий позволяют выращивать размерно-квантованные структуры различных размерностей и геометрических форм. Одним из наиболее интенсивно исследуемых объектов этого класса на сегодняшний день являются полупроводниковые квантовые точки (КТ), выращенные в различных диэлектрических средах. Важной особенностью КТ является полная квантованность энергии носителей заряда (НЗ), находящихся в них. Этим они напоминают реальные атомы и поэтому их часто называют "искусственными атомами". Полная квантованность спектра НЗ в КТ позволяет использовать их в качестве рабочего тела (активной среды) для полупроводниковых лазеров, обладающих уникальными свойствами (высокая стабильность, сверхвысокие значения усиления материала и т.д. [1]). Для теоретического описания физических процессов, происходящих в КТ, возникает необходимость построения математической модели КТ. Иначе говоря, надо максимально точно представить квантомеханическую модель ямы, в которой находится НЗ. Действительно, ведь именно этим членом в уравнении Шредингера для НЗ определяется симметрия конкретной задачи (эффективная масса считается изотропной), а, значит, и степень вырожденности энергетических уровней НЗ.

Надо отметить, что вид этого потенциала во многом зависит и от метода выращивания КТ [2]. Примечательным в этом отношении яв-

ляется пример обобщения теоремы Кона [3] на случай КТ. Именно благодаря правильной математической модели ограничивающего потенциала ($U_{conf} = \gamma r^2$) удалось теоретически обосновать обобщение этой теоремы на случай размерно-квантованных систем.

С другой стороны, ясно, что вид ограничивающего потенциала $U_{conf} = \gamma r^2$ можно использовать для нижних уровней. С приближением к границе полупроводник-диэлектрик ход кривой потенциала становится отличным от параболического. Это отклонение хода ограничивающего потенциала от параболического приводит к нарушению теоремы Кона. Простейшие модели КТ с учетом этой ситуации рассматривались в работах [4,5].

В предлагаемой статье исследуются электронные уровни в сферической КТ GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs с учетом отклонения хода кривой ограничивающего потенциала от параболического на границе полупроводник-диэлектрик. При этом нами обсуждаются две модели потенциальной энергии электрона внутри диэлектрика. В первом случае эта энергия является квадратичной функцией r , а во втором – линейной.

2. Теория

2.1

Рассмотрим энергетические уровни электрона в сферической КТ GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs, ограничивающий потенциал которой имеет вид

$$U(r) = \begin{cases} U_1(r) = \frac{\mu_1 \omega_1^2 r^2}{2}, & r < r_0 \\ U_2(r) = \frac{\mu_2 \omega_2^2 r^2}{2} + U_0 - \frac{\mu_2 \omega_2^2 r_0^2}{2}, & r \geq r_0, \end{cases} \quad (1)$$

где r_0 – радиус КТ, μ_1 – эффективная масса электрона в КТ (для GaAs $\mu_1 = 0.067m_e$), μ_2 – эффективная масса электрона в диэлектрической среде (для Ga_{1-x}Al_xAs $\mu_2 = (0.067 + 0.083x)m_e$, $U_0 = 1.247xQ_e$ эВ ($Q_e = 0.6$), x – концентрация Al, ω_1 определяется из условия непрерывности потенциальной энергии $U(r)$ в точке $r = r_0$ [6]:

$$\omega_1 = \frac{1}{r_0} \sqrt{\frac{2U_0}{\mu_1}}. \quad (2)$$

Для ω_2 рассмотрим две модели:

$$\text{а) } \frac{\mu_2 \omega_2^2 r_0^2}{2} = \gamma U_0, \quad \omega_2 = \frac{1}{r_0} \sqrt{\frac{2\gamma U_0}{\mu_2}}, \quad (3)$$

$$\text{б) } \frac{\mu_1 \omega_1^2 a^2}{2} = \frac{\mu_2 \omega_2^2 a^2}{2}, \quad \omega_2 = \frac{1}{a} \sqrt{\frac{2U_0}{\mu_2}} = \frac{r_0}{a} \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}} \omega_1, \quad (4)$$

где γ и a – новые параметры нашей задачи.

Энергетические уровни электрона могут быть найдены из условия непрерывности логарифмических производных волновых функций, описывающих состояния частицы в областях $r < r_0$ и $r \geq r_0$, в точке $r = r_0$.

Уравнение Шредингера для области $r < r_0$ имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_1}\Delta\Psi_1 + \frac{\mu_1\omega_1^2 r^2}{2}\Psi_1 = E\Psi_1. \quad (5)$$

Нерасходящееся решение этого уравнения запишется как [7]

$$\Psi_1(r, \theta, \varphi) = C_1 e^{-\frac{\xi_1^2}{2}} r^l {}_1F_1\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{E}{\hbar\omega_1} - l - \frac{3}{2}\right), l + \frac{3}{2}; \xi_1^2\right] Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (6)$$

где $\xi_1 = r\sqrt{\mu_1\omega_1/\hbar}$, $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ – сферическая функция, l, m – соответственно орбитальное и магнитное квантовые числа, ${}_1F_1(a, b; x)$ – вырожденная гипергеометрическая функция первого порядка, C_1 – нормировочная постоянная.

Для области $r \geq r_0$ уравнение Шредингера выглядит следующим образом:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_2}\Delta\Psi_2 + \left(\frac{\mu_2\omega_2^2 r^2}{2} + U_0 - \frac{\mu_2\omega_2^2 r_0^2}{2}\right)\Psi_2 = E\Psi_2. \quad (7)$$

Нерасходящееся при $r \rightarrow \infty$ решение этого уравнения имеет вид [7]

$$\Psi_2(r, \theta, \varphi) = C_2 e^{-\frac{\xi_2^2}{2}} r^l U\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\varepsilon}{\hbar\omega_2} - l - \frac{3}{2}\right), l + \frac{3}{2}; \xi_2^2\right] Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (8)$$

где $\varepsilon = E - U_0 + \mu_2\omega_2^2 r_0^2/2$, $\xi_2 = r\sqrt{\mu_2\omega_2/\hbar}$, $U(a, b; x)$ – вырожденная гипергеометрическая функция второго порядка, C_2 – нормировочная постоянная. Таким образом, решение уравнения Шредингера для обеих областей можно выразить как

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \begin{cases} \Psi_1(r, \theta, \varphi) = C_1 e^{-\frac{a_1 r^2}{2}} r^l {}_1F_1\left[n_{1l}, l + \frac{3}{2}; a_1 r^2\right] Y_{lm}(\theta, \varphi), & r < r_0, \\ \Psi_2(r, \theta, \varphi) = C_2 e^{-\frac{a_2 r^2}{2}} r^l U\left[n_{2l}, l + \frac{3}{2}; a_2 r^2\right] Y_{lm}(\theta, \varphi), & r \geq r_0, \end{cases} \quad (9)$$

где введены следующие обозначения:

$$a_1 = \frac{\mu_1\omega_1}{\hbar}, \quad a_2 = \frac{\mu_2\omega_2}{\hbar}, \quad n_{1l} = -\frac{1}{2}\left(\frac{E}{\hbar\omega_1} - l - \frac{3}{2}\right), \quad E = \frac{\hbar\omega_1}{2}(2l + 3 - 4n_{1l}),$$

$$n_{2l} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon}{\hbar \omega_2} - l - \frac{3}{2} \right) = -\frac{1}{2} \left(\frac{E - U_0 + \frac{\mu_2 \omega_2^2 r_0^2}{2}}{\hbar \omega_2} - l - \frac{3}{2} \right). \quad (10)$$

Из условия нормировки и непрерывности волновых функций Ψ_1 и Ψ_2 для C_1 и C_2 имеем

$$C_1 = C, \quad C_2 = CA_l,$$

$$A_l = e^{-\frac{a_1 - a_2}{2} r_0^2} \frac{{}_1F_1 \left[n_{1l}, l + \frac{3}{2}; a_1 r_0^2 \right]}{U \left[n_{2l}, l + \frac{3}{2}; a_2 r_0^2 \right]}, \quad C^2 = \frac{1}{I_{1l} + A_l^2 I_{2l}},$$

$$I_{1l} = \int_0^{r_0} e^{-a_1 r^2} r^{2l+2} \left\{ {}_1F_1 \left[n_{1l}, l + \frac{3}{2}; a_1 r^2 \right] \right\}^2 dr,$$

$$I_{2l} = \int_{r_0}^{\infty} e^{-a_2 r^2} r^{2l+2} \left\{ U \left[n_{2l}, l + \frac{3}{2}; a_2 r^2 \right] \right\}^2 dr. \quad (11)$$

Отметим, что соответствующие волновые функции при предельных переходах $\gamma \rightarrow 0$, $a \rightarrow \infty \Rightarrow \omega_2 \rightarrow 0$ (что соответствует случаю постоянной потенциальной энергии внутри диэлектрика) становятся волновыми функциями, рассмотренными в работе [4]: $\Psi_2(r, \theta, \varphi) \rightarrow Ch_l^{(+)}(ikr)$, $k = \sqrt{2\mu_2(U_0 - E)/\hbar}$, где $h_l^{(+)}(x)$ – функция Ганкеля.

Условие непрерывности логарифмических производных волновых функций $\Psi_1(r, \theta, \varphi)$ и $\Psi_2(r, \theta, \varphi)$ в точке $r = r_0$

$$\frac{1}{\mu_2} \Psi_2' \Big|_{r=r_0} = \frac{1}{\mu_2} \Psi_1' \Big|_{r=r_0} \quad (12)$$

принимает следующую форму:

$$\frac{\mu_2}{\mu_1} \left\{ \frac{1}{2} (l - a_1 r_0^2) + a_1 r_0^2 \frac{4n_{1l}}{l + \frac{3}{2}} \frac{{}_1F_1 \left[n_{1l} + 1, l + \frac{5}{2}; a_1 r_0^2 \right]}{{}_1F_1 \left[n_{1l}, l + \frac{3}{2}; a_1 r_0^2 \right]} \right\} =$$

$$= \left\{ \frac{1}{2} (l - a_2 r_0^2) - a_2 r_0^2 n_{2l} \frac{U \left[n_{1l} + 1, l + \frac{5}{2}; a_2 r_0^2 \right]}{U \left[n_{2l}, l + \frac{3}{2}; a_2 r_0^2 \right]} \right\}. \quad (13)$$

В частности, для основного состояния ($l = 0, m = 0$)

$$\frac{\mu_2}{\mu_1} \frac{a_1}{a_2} \left\{ 1 - \frac{4n_{10}}{3} \frac{{}_1F_1\left[n_{10} + 1, \frac{5}{2}; a_1 r_0^2\right]}{{}_1F_1\left[n_{10}, \frac{3}{2}; a_1 r_0^2\right]} \right\} = 1 - 2n_{20} \frac{U\left[n_{20} + 1, \frac{5}{2}; a_2 r_0^2\right]}{U\left[n_{20}, \frac{3}{2}; a_2 r_0^2\right]} \quad (14)$$

2.2

Теперь рассмотрим энергетические уровни электрона в сферической КТ GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs, ограничивающий потенциал которой в области $r \geq r_0$ меняется по линейному закону, т.е.

$$U(r) = \begin{cases} U_1(r) = \frac{\mu_1 \omega^2 r^2}{2}, & r < r_0, \\ U_2(r) = kr + U_0 - kr_0, & r \geq r_0, \end{cases} \quad (15)$$

где $\omega = (1/r_0)\sqrt{2U_0/\mu_1}$ – ограничивающая частота КТ [6], k – варьируемый параметр, $U_0 = \mu_1 \omega^2 r_0^2 / 2$, μ_1 – эффективная масса электрона в области $r < r_0$, r_0 – радиус КТ.

Решением уравнения Шредингера для области $r < r_0$ является функция сферического осциллятора

$$\Psi_1(r, \theta, \varphi) = C_1 e^{-\frac{\xi_1^2}{2}} {}_1F_1\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{E}{\hbar\omega} - l - \frac{3}{2}\right), l + \frac{3}{2}; \xi_1^2\right] Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad \xi_1 = r \sqrt{\frac{\mu_1 \omega}{\hbar}}, \quad (16)$$

где C_1 – нормировочная постоянная.

Для области $r \geq r_0$ уравнение Шредингера имеет вид

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \left(\frac{2\mu_2}{\hbar^2} (\varepsilon - kr) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \right] \chi_{2l}(r) = 0, \quad (17)$$

где мы ввели функцию $\chi_{2l}(r)$ согласно равенству

$$\Psi_2(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} \chi_{2l}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad \varepsilon = E - U_0 + kr_0. \quad (18)$$

Для основного уровня энергии $l=0$ решение уравнения Шредингера (17) запишется как [8]

$$\chi_{20}(r) = C_2 \text{Ai}\left(\left(\frac{2\mu_2}{\hbar^2 k^2}\right)^{\frac{1}{3}} (k(r-r_0) - (U_0 - E))\right), \quad (19)$$

где $\text{Ai}(x)$ – функция Эйри, μ_2 – эффективная масса электрона в области $r > r_0$, C_2 – нормировочная постоянная.

Окончательно для волновых функций основного состояния можем записать:

$$\Psi_{l=0}(r, \theta, \varphi) = \begin{cases} \Psi_1 = \frac{C}{\sqrt{4\pi}} e^{-\frac{a_1}{2}r^2} {}_1F_1\left[n_1, \frac{3}{2}; a_1 r^2\right], & r < r_0 \\ \Psi_2 = \frac{CA}{\sqrt{4\pi}} \frac{1}{r} \text{Ai}(a_2 r + n_2), & r \geq r_0, \end{cases} \quad (20)$$

где

$$A = e^{-\frac{a_1}{2}r_0^2} r_0 \frac{{}_1F_1\left[n_1, \frac{3}{2}; a_1 r_0^2\right]}{\text{Ai}(a_2 r_0 + n_2)}, \quad a_1 = \frac{\mu_1 \omega}{\hbar}, \quad n_1 = \frac{1}{2} \left(\frac{E}{\hbar \omega} - \frac{3}{2} \right), \quad a_2 = \left(\frac{2\mu_2}{\hbar^2 k^2} \right)^{\frac{1}{3}} k, \\ n_2 = - \left(\frac{2\mu_2}{\hbar^2 k^2} \right)^{\frac{1}{3}} (k r_0 + E - U_0), \\ C = \left(\int_0^{r_0} e^{-a_1 r^2} r^2 \left\{ {}_1F_1\left[n_1, \frac{3}{2}; a_1 r^2\right] \right\}^2 dr + A^2 \int_{r_0}^{\infty} \text{Ai}^2(a_2 r + n_2) dr \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (21)$$

Энергию электрона можно определить из условия непрерывности логарифмических производных волновых функций Ψ_1 и Ψ_2 в точке $r = r_0$. Это условие в данном случае имеет вид

$$\frac{\mu_2}{\mu_1} \left\{ \frac{4n_1}{3} {}_1F_1\left[n_1 + 1, \frac{5}{2}; a_1 r_0^2\right] - {}_1F_1\left[n_1, \frac{3}{2}; a_1 r_0^2\right] \right\} \text{Ai}(a_2 r_0 + n_2) = \frac{1}{r_0^2} {}_1F_1\left[n_1, \frac{3}{2}; a_1 r_0^2\right] \times \\ \times \left\{ \frac{a_2 r_0}{3} (a_2 r_0 + n_2) \left[I_{-\frac{2}{3}}\left(\frac{2}{3}(a_2 r_0 + n_2)^{\frac{3}{2}}\right) - I_{\frac{2}{3}}\left(\frac{2}{3}(a_2 r_0 + n_2)^{\frac{3}{2}}\right) \right] - \text{Ai}(a_2 r_0 + n_2) \right\}, \quad (22)$$

где $I_\mu(x)$ — функция Бесселя.

Решая трансцендентные уравнения (13), (14), (22), можно исследовать зависимость энергии электрона от радиуса КТ r_0 и концентрации x , т.е. $E = E(x, r_0)$. В частности, фиксируя x , можно изучить зависимость $E = E(r_0)$, и наоборот — фиксируя r_0 , зависимость $E = E(x)$.

3. Обсуждение результатов

На рис.1 для первой модели (случай а) ограничивающего потенциала приведены графики зависимостей энергии электрона E для состояний с $l = m = 0$ (в единицах E_{R1} , соответствующих первой среде) от радиуса КЯ GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs r_0 (в единицах a_{B1}), для фиксированных параметров $x = 0.4$, $\gamma = 0.01$. Как следует из этого графика, с уменьшением r_0 энергия электрона увеличивается. Этого и следовало ожидать, т.к. согласно соотношению (3) при $r_0 \rightarrow 0 \Rightarrow \omega_2 \rightarrow \infty$. Обратная картина наблюдается при $r_0 \rightarrow \infty$. Отметим, что уровни в КЯ появляются, начиная с некоторого порогового значения r_0 ; например, для основного уровня $r_0 \approx 0.3a_{B1}$. Появление новых уровней в КЯ сопровождается изменением

скорости монотонного хода кривой зависимости $E(r)$

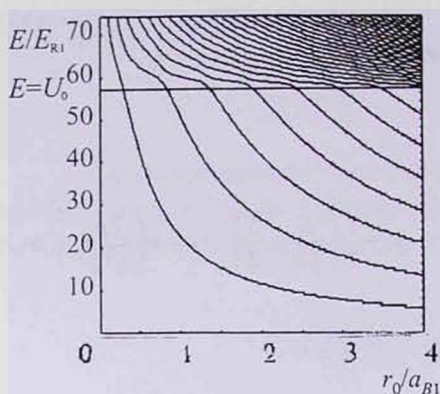


Рис.1.

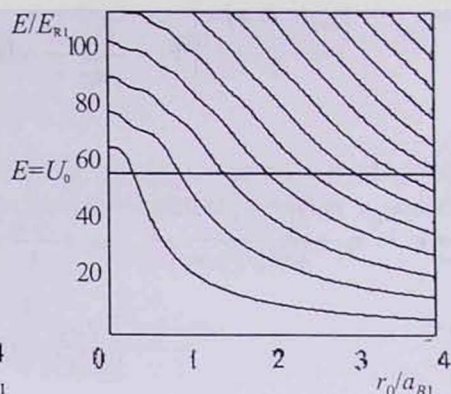


Рис.2.

На рис.2 приведены графики зависимостей $E(r)$ (в тех же единицах) для первой модели (случай б) ограничивающего потенциала при значениях параметров $x=0.4$, $a=2$. В отличие от случая а, здесь уровни энергии электрона при $r_0 \rightarrow 0$ стремятся к постоянным значениям. Эти значения соответствуют энергетическим уровням осциллятора с частотой ω_2 . Из этого рисунка видно, что при $r_0 \rightarrow 0$ уровни становятся эквидистантными. В остальном поведение $E(r)$ аналогично первому случаю.

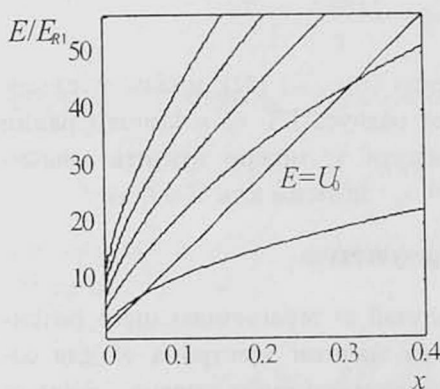


Рис.3.

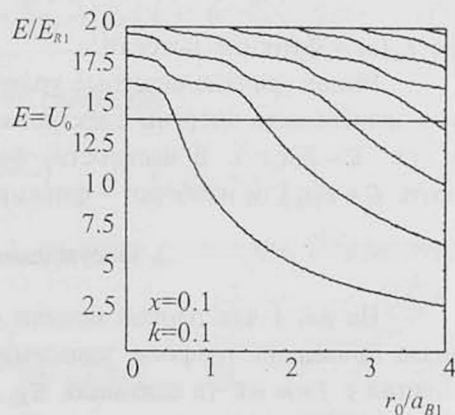


Рис.4.

На рис.3 для случая б приведены графики зависимостей энергии электрона от концентрации $Al\ x$ ($r_0=1$, $a=2$, $l=m=0$). Согласно этому рисунку, с увеличением x (увеличением высоты ограничивающего потенциала) увеличивается энергия электрона. При этом уровни в КЯ по-

являются теперь уже с некоторого порогового значения x .

На рис.4 для второго случая (линейная зависимость) представлены графики зависимостей электрона от радиуса КТ при фиксированных значениях $k = 0.1(E_{B1}/a_{B1})$ и $x = 0.1$. Как следует из него, и здесь уровни внутри КТ появляются начиная с некоторого значения r_0 . С ростом r_0 уровни как внутри КТ, так и вне опускаются. При этом понижение уровней внутри ямы происходит быстрее, чем вне.

На рис.5 также для второго случая приведены графики зависимостей энергии электрона от концентрации Al (от высоты потенциального барьера U_0) при фиксированных значениях радиуса КТ ($r_0 = a_{B1}$) и коэффициента $k = 0.1(E_{B1}/a_{B1})$. Поведение $E(x)$ аналогично первому случаю. Численный анализ показывает, что с увеличением k уровни поднимаются. Что касается уровней $E > U_0$, то, как видно из рисунка, они расположены значительно ближе друг к другу.

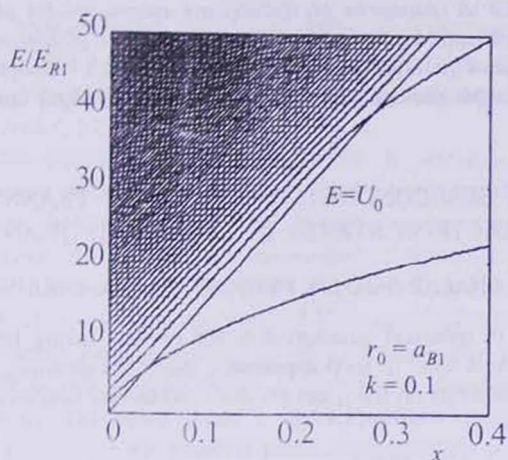


Рис.5.

Как следует из выражений (13,14,22), определяющих спектр энергии электрона в КТ, значения этих уровней явно зависят от орбитального квантового числа l . Таким образом, имеет место снятие случайного вырождения по l из-за учета граничных условий. Иными словами, гамильтонианы данных моделей теперь уже не обладают повышенной симметрией $U(3)$. Другим важным обстоятельством учета граничных условий является то, что эти гамильтонианы уже не являются точно диагонализруемыми, и, следовательно, в таких КТ имеет место нарушение обобщенной теоремы Кона [3].

Данная работа выполнена при поддержке программы INTAS-99-00928.

ЛИТЕРАТУРА

1. Н.Н.Леденцов и др. ФТП, **32**, 385 (1998).
2. J.A.Barker and E.P.O'Reilly. Physica E, **4**, 231 (1999).
3. P.A.Maksym and T.Chakraborty. Phys. Rev. Lett., **65**, 108 (1990).
4. E.M.Ghazaryan, L.S.Petrosyan, and H.A.Sarkisyan. Proc. Int. Coll. GROUP23, Dubna, **1**, 43 (2001).
5. П.Г.Елисеев. Квантовая электроника, **30**, 152 (2000).
6. J.-L.Zhu et al. J. Phys. C, **10**, 583 (1998).
7. И.С.Градштейн, И.М.Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М., Физматгиз, 1962.
8. Л.Д.Ландау и Е.М.Лифшиц. Квантовая механика. М., Наука, 1989.

ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴԻՉ-ԴԻԷԼԵԿՏՐԻԿ ԱՆՑՍԱՆ ՍԱՀՍԱՆԻ ԱԶԳԵՑՈՒԹՅՈՒՆԸ
ԷԼԵԿՏՐՈՆԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԻ ՎՐԱ ԳՆԴԱՅԻՆ ԲՎԱՆՏԱՅԻՆ ԿԵՏԵՐՈՒՄ

Է.Մ. ԴԱԶԱՐՅԱՆ, Լ.Ս. ՊԵՏՐՈՍՅԱՆ, Ի.Ա. ՍԱՐԳՍՅԱՆ

Ուսումնասիրված են էլեկտրոնային վիճակները պարաբոլային քվանտային կետերում սահմանային պայմանների հաշվառմամբ: Բացահայտված է քվանտային կետերի ներսում վիճակների առաջացման շեմային բնույթը: Ուսումնասիրված է էլեկտրոնի էներգիայի կախվածությունը քվանտային կետերի շառավղից և սահմանափակող պոտենցիալի բարձրությունից:

INFLUENCE OF SEMICONDUCTOR-DIELECTRIC TRANSITION BORDER ON THE ELECTRON STATES IN SPHERICAL QUANTUM DOTS

E.M. GHAZARYAN, L.S. PETROSYAN, H.A. SARKISYAN

Electron states in spherical quantum dots are studied, taking into account boundary conditions. The threshold habit of level appearance inside the quantum dots is revealed. The electron energy dependences on the quantum dot's radius and confinement potential height are studied.