

УДК 621.315

ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В СФЕРИЧЕСКИХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ С ВУД-САКСОНОВСКИМ ОГРАНИЧИВАЮЩИМ ПОТЕНЦИАЛОМ

Л.С. ПЕТРОСЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 2 февраля 2002 г.)

Исследованы электронные состояния в сферических квантовых точках с вуд-саксоновским ограничивающим потенциалом. Выявлен пороговый характер появления энергетических уровней электрона внутри квантовых точек. Изучены зависимости энергии электрона от радиуса квантовой точки и высоты ограничивающего потенциала. Учтена зависимость эффективной массы электрона от координаты r .

Введение

С развитием нанотехнологий стало возможным выращивание размерно-квантованных структур различных размерностей и геометрических форм. В последние годы наиболее активно исследуемыми размерно-квантованными системами являются полупроводниковые квантовые точки (КТ). Эти структуры выращены в различных диэлектрических средах, и поскольку их геометрические размеры сравнимы с дебройлевскими длинами волн носителей заряда (НЗ), находящихся в них, то энергетический спектр последних является полностью квантованным. Вид энергетического спектра во многом зависит от модели ограничивающего потенциала (ОП) КТ. Надо отметить, что форма этого потенциала зависит от метода выращивания КТ [1]. В связи с вышесказанным при изучении поведения частицы в КТ важную роль играет правильная теоретическая аппроксимация ОП ямы. Разными авторами были предложены различные модели ОП (см., напр., [2-6]).

Наиболее интенсивно исследуемыми КТ являются структуры из GaAs, выращенные в $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$. Для них часто используется модель сферической прямоугольной ямы конечной глубины [2]. Здесь подразумевается что сама КТ – чистый полупроводник GaAs, а окружает ее сплав $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$, где x – концентрация Al. Иначе говоря, подразумевается что концентрация Al скачкообразно возрастает от 0 внутри КТ до x внутри сплава. Ясно, что в реальных КТ такого поведения концентрации техно-

логически добиться очень трудно. Концентрация и вместе с нею характер ОП (т.к. $U = Ax = 1.247 \cdot 0.6 \cdot x$ для $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$) меняются непрерывным образом [6]. Теоретически такую модель ОП можно построить с помощью потенциала Вуда-Саксона (ВС) $U(r) = Ax(r)$, $x(r) = x_0(e^{(r-r_0)/a} - e^{-r_0/a}) / (1 + e^{(r-r_0)/a})$, где x_0 – максимальная концентрация Al внутри сплава, $U_0 = Ax_0$ – высота барьера (рис.1) [7]. Этот потенциал использовался в ядерной физике для описания взаимодействия нейтрона с тяжелым ядром. Параметр r_0 интерпретируется как радиус ядра (в рассматриваемом случае – радиус КТ), другой параметр a характеризует толщину поверхностного слоя, внутри которого потенциал падает от $U = U_0$ снаружи ядра (КТ) до значения $U = 0$ внутри ядра (КТ). При $a = 0$ получается простая потенциальная яма со скачком потенциала на поверхности ядра (КТ).

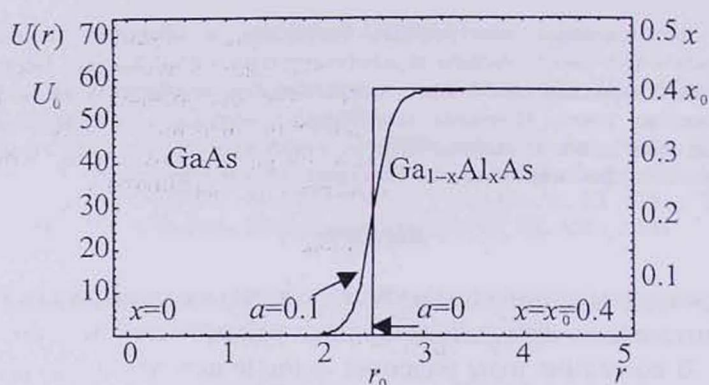


Рис.1 Зависимость концентрации Al и потенциальной энергии от координаты r для $a = 0.1$ и $a = 0$ (прямоугольная яма конечной глубины).

Отметим что эффективная масса (ЭМ) НЗ в $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ тоже зависит от концентрации Al линейным образом: $\mu(r) = (0.067 + 0.083x(r))m_e$, где m_e – масса свободного электрона.

В настоящей работе исследуются электронные уровни в сферических квантовых точках с ВС ОП.

Теория

Рассмотрим электронные уровни в КТ с ВС ОП. Так как с учетом зависимости ЭМ от координаты r уравнение Шредингера усложняется и не имеет аналитического решения, то мы будем подразумевать, что $\mu_1 = \mu(x=0) = 0.067m_e$ внутри КТ и $\mu_2 = \mu(x=x_0) = (0.067 + 0.083x_0)m_e$ вне ее. Тогда уравнение Шредингера для случая $l=0$ (l – орбитальное квантовое число) имеет аналитическое решение. Для радиальных волновых функций электрона внутри и вне КТ уравнение Шредингера имеет

$$\begin{aligned}\frac{d^2 R_1}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_1}{dr} + \frac{2\mu_1}{\hbar^2} (E - U(r)) R_1 &= 0, \quad r < r_0, \\ \frac{d^2 R_2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_2}{dr} + \frac{2\mu_2}{\hbar^2} (E - U(r)) R_2 &= 0, \quad r > r_0.\end{aligned}\quad (2)$$

С ВС потенциалом оно имеет следующее решение [7]:

$$R(r) = \frac{C}{r} \begin{cases} f_{11} + A f_{12}, & r < r_0, \\ B f_{12}, & r > r_0, \end{cases} \quad (3)$$

где C – постоянная нормировки, и сделаны следующие обозначения:

$$f_{11} = y^{\beta_1} (1-y)^{\alpha_1} {}_2F_1[\alpha_1 + \beta_1, \alpha_1 + \beta_1 + 1, 2\beta_1 + 1; y],$$

$$f_{12} = y^{\beta_2} (1-y)^{\alpha_2} {}_2F_1[\alpha_2 + \beta_2, \alpha_2 + \beta_2 + 1, 2\beta_2 + 1; y],$$

$$f_2 = y^{-\beta_1} (1-y)^{\alpha_1} {}_2F_1[\alpha_1 - \beta_1, \alpha_1 - \beta_1 + 1, -2\beta_1 + 1; y],$$

$$y = \frac{1}{1 + e^{\frac{r-r_0}{a}}}, \quad \beta_1 = a \sqrt{\frac{2\mu_1(U_0 - E)}{\hbar^2}}, \quad \alpha_1 = a \sqrt{-\frac{2\mu_1 \left(e^{-\frac{r_0}{a}} U_0 + E \right)}{\hbar^2}},$$

$$\beta_2 = \sqrt{m_0} \beta_1, \quad \alpha_2 = \sqrt{m_0} \alpha_1, \quad m_0 = \frac{\mu_2}{\mu_1},$$

$$A = \frac{\left(f_{11} \left(\frac{f_{12}}{r} \right)' - m_0 f_{12} \left(\frac{f_{11}}{r} \right)' \right)_{r=r_0}}{\left(m_0 f_{12} \left(\frac{f_2}{r} \right)' - f_2 \left(\frac{f_{12}}{r} \right)' \right)_{r=r_0}}, \quad B = m_0 \frac{\left(f_{11} \left(\frac{f_2}{r} \right)' - f_2 \left(\frac{f_{11}}{r} \right)' \right)_{r=r_0}}{\left(m_0 f_{12} \left(\frac{f_2}{r} \right)' - f_2 \left(\frac{f_{12}}{r} \right)' \right)_{r=r_0}}.$$

Здесь уже учтена непрерывность волновой функции и ее производной в точке $r = r_0$. Энергетические уровни электрона можно определить из граничного условия в точке $r = 0$, т.е. $rR(r)|_{r=0} = 0$.

Чтобы учесть также зависимость ЭМ НЗ от r (от x) будем использовать метод теорий возмущений, применяемый в ядерной физике для расчета смещения энергетического уровня K -электрона в тяжелых атомах, обусловленного конечностью радиуса ядра [7]. Тогда гамильтониан данной задачи можно представить в виде

$$\hat{H} = \hat{\mathbf{p}} \frac{1}{2\mu(r)} \hat{\mathbf{p}} + U(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \Delta - \frac{\hbar^2}{2\mu(r)} (1 - \mu_0(r)) \Delta + \frac{\hbar^2}{2\mu(r)} \frac{\mu'_0(r)}{\mu_0(r)} \frac{\partial}{\partial r} + U(r), \quad (4)$$

где $\mu_0(r) = \mu(r) / \mu_1$. В качестве невозмущенной задачи будем рассматривать состояние электрона в прямоугольной потенциальной яме (ППЯ) с

$$\mu_1(r) = \begin{cases} \mu_1, & r < r_0 \\ \mu_2, & r > r_0 \end{cases} \quad \text{и} \quad U_1(r) = \begin{cases} 0, & r < r_0, \\ U_0, & r > r_0, \end{cases} \quad \text{а как возмущенную — задачу, в}$$

которой ЭМ $\mu_2(r)$ и ОП $U_2(r)$ меняются по закону ВС соответственно от μ_1 до μ_2 и от 0 до U_0 . Тогда гамильтониан возмущенной задачи можно представить как сумму гамильтониана невозмущенной задачи и энергии возмущения, которая равна разности гамильтонианов вышеперечисленных двух задач, т.е. $\hat{H}_2 = \hat{H}_1 + \hat{V}$, где возмущение имеет вид

$$\hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \Delta \left(\frac{1}{\mu_2(r)} - \frac{1}{\mu_1(r)} \right) + \frac{\hbar^2}{2\mu_1} \left(\frac{\mu_2'(r)}{\mu_2^2(r)} - \frac{\mu_1'(r)}{\mu_1^2(r)} \right) \frac{\partial}{\partial r} + U_2(r) - U_1(r). \quad (5)$$

Полная энергия возмущенной задачи имеет вид $E_{nl} = E_{nl}^0 + E_{nl}^1$, где E_{nl}^0 — энергетические уровни НЗ в ППЯ, $E_{nl}^1 = V_{nl} = \int \Psi^* \hat{V} \Psi dv$ — поправки к энергии E_{nl}^0 (матричные элементы оператора возмущения).

Обсуждение результатов

На рис.2 представлены графики зависимостей энергии электрона E от радиуса КТ r_0 (в эффективных боровских единицах E_{R1}, a_{R1} , соответствующих первой среде) при фиксированных параметрах $x_0 = 0.4$, $\alpha = 0.14$. Сплошные линии соответствуют ВС ОП для двух случаев: $\mu_1 = \mu_2$ (вверху) и $\mu_1 \neq \mu_2$ (внизу). Уровни в КТ появляются, начиная с некоторого порогового значения r_0 . Уровни с $\mu_1 = \mu_2$ расположены не-

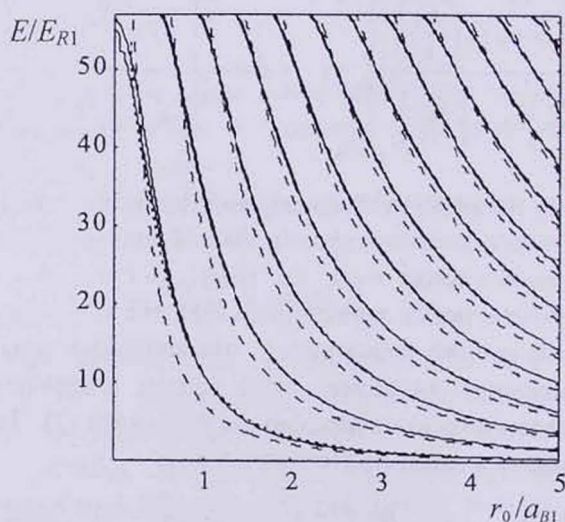


Рис.2. Зависимость энергии электрона от радиуса КТ.

много выше по сравнению со случаем $\mu_1 \neq \mu_2$, т.к. $\mu_2 > \mu_1$ и энергия НЗ во второй среде обратно пропорциональна μ_2 . Это различие уменьшается при больших r_0 и при малых E . Прерывающиеся кривые соответствуют случаю ППЯ. Так как при не слишком больших энергиях потенциал ВС расположен выше ППЯ, то графики, соответствующие ему, до некоторого порогового E расположены выше. При увеличении r_0 имеет место обратная картина и, как видно из рисунка, уровни в ППЯ появляются позже. Это различие уменьшается при больших r_0 , и кривые сливаются. Наконец, точечная линия соответствует случаю, когда учтена зависимость $\mu(r)$ ($n=l=m=0$). Как видно из рисунка, вышеупомянутые свойства сохраняются, и кривые довольно хорошо согласуются друг с другом.

Данная работа выполнена при поддержке программы INTAS-99-00928 и гранта ANSEF (Armenian National Science and Education Fund) PS24-01.

ЛИТЕРАТУРА

1. J.A.Barker and E.P.O'Reilly. Physica E, **4**, 231 (1999).
2. S.V.Branis et al. Phys. Rev. B, **47**, 1316 (1999).
3. K.G.Dvovyan and E.M.Ghazaryan. Phys. Stat. Sol. (b), **228**, 695 (2001).
4. P.A.Maksym and T.Chakraborty. Phys. Rev. Lett., **65**, 108 (1990).
5. E.M.Ghazaryan, L.S.Petrosyan and H.A.Sarkisyan. Proc. Int. Coll. GROUP23, Dubna, **1**, 43 (2001).
6. S.Vlaev and D.A.Contreras-Solorio. J. Appl. Phys., **82**, 3853 (1997).
7. З.Флюгге. Задачи по квантовой механике, т.1. М., Мир, 1974.

ԷԼԵԿՏՐՈՆԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ ՎՈՒՂ-ՍԱՔՍՈՆԻ ՍԱՀՄԱՆԱՓԱԿՈՂ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼՈՎ ԳՆԴԱՅԻՆ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԿԵՏԵՐՈՒՄ

Լ.Ս. ՊԵՏՐՈՍՅԱՆ

Ուսումնասիրված են էլեկտրոնային վիճակները Վուդ-Սաքսոնի սահմանափակող պոտենցիալով գնդային քվանտային կետերում: Բացահայտված է քվանտային կետերի ներսում վիճակների առաջացման շեմային բնույթը: Ուսումնասիրված է էլեկտրոնի էներգիայի կախվածությունը քվանտային կետերի շառավղից և սահմանափակող պոտենցիալի բարձրությունից: Հաշվի է առնված էլեկտրոնի արդյունաբար զանգվածի կախվածությունը r կոորդինատից:

ELECTRON STATES IN SPHERICAL QUANTUM DOTS WITH WOOD-SAXON'S CONFINEMENT POTENTIAL

L.S. PETROSYAN

Electron states in spherical quantum dots with Wood-Saxon's confinement potential are studied. The threshold habit of level appearance inside the dots is revealed. The electron energy dependences on the QD's radius and confinement potential height are studied.