Известия НАН Армении, Физика, т.37, №4, с.237-243 (2002)

УДК 621.315

КВАНТОВО-РАЗМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ ШТАРКА В ПОЛУПРОВОДНИКОВОМ СФЕРИЧЕСКОМ СЛОЕ

В.А. АРУТЮНЯН, Г.Г. СУЛТАНЯН

Гюмрийский образовательный комплекс

Государственного инженерного университета Армении

(Поступила в редакцию 18 марта 2002 г.)

Рассмотрены состояния носителей заряда в квантованном сферическом слое. Предложена физически адекватная модель, позволяющая в аналитическом виде определить энергетический спектр и волновые функции одноэлектронных состояний. В рамках теории возмущений рассчитана величина штарковского сдвига уровней под воздействием однородного внешнего поля. Получена явная зависимость величины энергетического сдвига от напряженности внешнего поля и геометрических размеров образца.

1. Введение

В настоящее время интенсивно исследуются оптические и электрооптические свойства различных квазинульмерных структур со сферической симметрией – как квантовых точек (см., напр., обзор [1]), так и многослойных сферических наногетероструктур [2-6]. Эти исследования стимулированы тем, что подобные гетерофазные системы являются очень перспективными материалами для создания новейших элементов современной оптоэлектроники. Ясно, что при изучении подобных структур необходимым звеном является исследование физических свойств "отдельно взятого" нанокристаллического сферического слоя. Как с чисто физической, так и с прикладной точек зрения, подобный нанокристалл интересен прежде всего тем, что "синтезирует" в себе как свойства квантованных пленок (КП), так и сферических квантовых точек (КТ), и в силу "комбинирования" уникальных свойств последних может иметь применение как в "чистом" виде, так и в качестве составной компоненты при создании многослойных сферических наногетероструктур. В этой связи определенный интерес представляет, в частности, исследование влияния внешего электрического поля на состояния носителей заряда в таком слое. Штарковскому расщеплению уровней и электрооптическим явлениям в КП посвящено множество как экспериментальных, так и теоретических работ (см., напр., обзор [7]). В ряде работ рассмотрен также квантово-размерный эффект Штарка в квантовых точках сферической формы [8-10]. Так, в [8,9] экспериментально выявлена зависимость величины штарковского сдвига уровней от геометрических размеров образца, обусловленная квантованием движения электронов и дырок, а в [10] развита теория Штарк-эффекта в КТ при условиях, когда, помимо отдельного квантования движения каждого из носителей, возможно также и связывание электронно-дырочной пары в объемный экситон, и предложен новый электрооптический метод для определения "критических" размеров сферы, выше которых становится возможным образование в ней трехмерного экситона. Насколько нам известно, работ, в которых рассматривалось бы влияние однородного электрического поля на перестройку энергетического спектра носителей заряда в сферическом слое, к настоящему времени нет.

Цель настоящей работы – теоретическое рассмотрение штарковского сдвига энергетических уровней носителей заряда в полупроводниковом сферическом слое. Из самых общих соображений ясно, что физическая специфичность слоя наиболее ярко будет проявляться в том случае, если:

а) слой достаточно "тонкий", т.е. имеет место режим "сильного" квантования. Иначе говоря, толщина пленки L должна быть много меньше боровского радиуса трехмерного экситона a_0 :

$$R_2 - R_1 = L << a_0 \ , \tag{1}$$

где R_1, R_2 – соответственно внутренний и внешний радиусы слоя.

б) внутренний радиус слоя R_1 не является слишком "большим", т.е. радиус кривизны слоя достаточно мал, чтобы слой можно было рассматривать как "чисто" сферический. Иначе говоря, R_1 должен меняться в интервале

$$L \le R_1 < a_0 \ . \tag{2}$$

Очевидно, что в противоположном случае, когда эти условия не имеют места, задачу в итоге можно свести либо к случаю квантованной сферы, либо к случаю "обычной" пленки.

2. Электронные состояния в слое

В силу условия (1) кулоновским взаимодействием между носителями можно пренебречь и по аналогии с "обычной" пленкой [1-7] в радиальном направлении аппроксимировать слой бесконечно глубокой потенциальной ямой:

$$U(r) = \begin{cases} 0 & \text{при} \quad R_1 < r < R_2 \ , \\ \infty & \text{при} \quad r \le R_1 \ , \ r \ge R_2 \ . \end{cases} \tag{3}$$

С другой стороны, в силу того же условия (1), т.е. в силу "тонкости" слоя, орбитальное движение носителей можно описать в рамках модели жесткого ротатора. Действительно, в пределах слоя "центробежная" энергия $U_\ell(r) = \hbar^2 \ell(\ell+1)/2\mu r^2$ "особенностей" по переменной r не имеет и меняется сравнительно мало, и посему без потери общности ее можно заменить энергией ротационного движения с эффективным радиусом R_0, определяемым следующим условием:

$$\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu R_0^2} = \frac{1}{2}\left[U_\ell(R_1) + U_\ell(R_2)\right]. \tag{4}$$

Сделанное приближение не затрагивает физической сути задачи, однако существенно упрощает все последующие вычисления и позволяет получить конечные результаты в аналитическом виде. Ограничимся рамками двухзонной модели. Для случая простых невырожденных зон (и в приближении изотропной эффективной массы) огибающие волновые функции электрона в сферических координатах (r, θ, φ) ищем в виде

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Phi(r) \mathrm{Y}_{\ell,m}(\theta, \varphi), \tag{5}$$

где $\Phi(r)$ – радиальная часть полной огибающей волновой функции электрона $\Psi(\mathbf{r})$, а $\mathrm{Y}_{\ell,m}(\theta,\varphi)$ – нормированные сферические функции. Вид последних хорошо известен (см., напр., [11]), и в явном виде их выписывать мы не будем. Сделав "стандартную" подстановку

$$\Phi(r) = \frac{\chi(r)}{r}, \tag{6}$$

в приближении изотропной эффективной массы (μ) приходим к следующему "радиальному" уравнению Шредингера:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\chi'' + \mathrm{E}\chi - \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2}\chi = 0, \tag{7}$$

где E – полная энергия частицы в слое. Проведя теперь в (7) замену (4) и воспользовавшись граничными условиями

$$\Phi(R_1) = \Phi(R_2) = 0, \tag{8}$$

для энергетического спектра и "радиальной" части огибающей волновой функции электрона получаем:

$$\mathrm{E}_{n,\ell} = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2\mu L^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu R_0^2}; \quad (n = 1,2,3\ldots..) \tag{9}$$

$$\Phi_n(r) = \sqrt{\frac{2}{L}}\,\frac{\sin\frac{\pi n}{L}(r - R_1)}{r}. \tag{10}$$

Как видим, в рамках предложенной модели энергия частицы представляет собой простую сумму энергий радиального и ротационного движений, а радиальная волновая функция – стоячую волну, начальная фаза которой определяется радиусом слоя R_1.

3. Штарковский сдвиг уровней

Если внешнее поле напряженности **F** направить вдоль оси z: $\mathbf{F} = \mathbf{F}(0,0,F)$, то для потенциала $\varphi(\mathbf{r})$ будем иметь [12]:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \left(Fr + \dfrac{A}{r^2}\right)\cos\theta & \text{при} \quad r \geq R_2\,, \\ \left(Br + \dfrac{C}{r^2}\right)\cos\theta & \text{при} \quad R_1 \leq r \leq R_2\,, \\ Dr\cos\theta & \text{при} \quad r \leq R_1\,. \end{cases} \tag{11}$$

В общем случае, когда диэлектрические проницаемости “ядра” (ε_1), собственно слоя (ε_2) и среды (ε_3) различны, из граничных условий для потенциала получаем следующие значения постоянных, определяющих значение потенциала внутри слоя:

$$B = \frac{C}{R_1^3}\frac{\varepsilon_3 + 2\varepsilon_2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_3}, \quad C = \frac{3F\varepsilon_1(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)R_1^3 R_2^3}{(\varepsilon_2 + 2\varepsilon_1)(\varepsilon_3 + 2\varepsilon_2)R_2^3 + 2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)R_1^3}\,. \tag{12}$$

Внешнее поле можно рассматривать как возмущение в том случае, если будет выполняться условие

$$\frac{qFL}{\varepsilon} << \mathrm{E}_{1,0}\,, \tag{13}$$

где q – заряд частицы, $\varepsilon = (2\varepsilon_{2,3} + \varepsilon_{2,1})/3$, $\varepsilon_{2,3} = \varepsilon_2/\varepsilon_3$, $\varepsilon_{2,1} = \varepsilon_2/\varepsilon_1$, а $\mathrm{E}_{1,0}$ – энергия основного состояния частицы в слое в отсутствие поля, т.е. если энергия, сообщаемая частице полем будет много меньше ее энергии квантованного движения в слое.

Нетрудно видеть, что диагональные элементы оператора возмущения

$$\hat{V} = q\left(Br + \frac{C}{r^2}\right)\cos\theta \tag{14}$$

обращаются в ноль, т.е. линейный Штарк-эффект в системе отсутствует.

По орбитальному (ℓ) и азимутальному (m) квантовым числам получаем следующие правила отбора: отличны от нуля только матричные элементы $V_{\ell,\ell\pm1}$ для переходов с сохранением $|m|$. Для поправки же второго порядка к энергетическому уровню в общем виде теперь имеем:

$$\Delta E_{n,\ell}^{(2)} = \left|V_{\ell,\ell-1}\right|^2 \sum_{n\neq n'} \frac{\left|V_{n,n'}\right|^2}{E_{n,\ell} - E_{n',\ell-1}} + \left|V_{\ell,\ell+1}\right|^2 \sum_{n\neq n'} \frac{\left|V_{n,n'}\right|^2}{E_{n,\ell} - E_{n',\ell+1}}, \qquad (15)$$

где $V_{n,n'}$ – матричный элемент оператора $\hat{V}$, построенный на радиальных волновых функциях из (10):

$$V_{n,n'} = q\frac{L}{\pi^2}\frac{8nn'}{\left(n^2 - n'^2\right)^2}\left[-B + C\frac{R_1^3 + R_2^3}{R_1^3 R_2^3}\right], \qquad (16)$$

а для $V_{\ell,\ell\pm1}$, соответственно, имеем:

$$V_{\ell,\ell\pm1} = \begin{cases} i\times\sqrt{\dfrac{(\ell+m)(\ell-m)}{(2\ell+1)(2\ell-1)}} & \text{при} \quad \ell\to\ell-1 \quad (\ell=1,2,\ldots), \\ -i\times\sqrt{\dfrac{(\ell+m+1)(\ell-m+1)}{(2\ell+3)(2\ell+1)}} & \text{при} \quad \ell\to\ell+1 \quad (\ell=0,1,2\ldots). \end{cases} \qquad (17)$$

Подставляя теперь (16) в (15) и проведя суммирование по n', для $\Delta E_{n,\ell}^{(2)}$ получаем:

$$\Delta E_{n,\ell}^{(2)} = \frac{q^2}{48n^2 E_{n,0}}\left[BL - CL\frac{R_1^3 + R_2^3}{R_1^3 R_2^3}\right]^2 \left(f_{n,\ell} + g_{n,\ell}\right), \qquad (18)$$

где $f_{n,\ell}, g_{n,\ell}$ имеют следующий вид:

$$f_{n,\ell} = \left(1 - \frac{15}{\pi^2 n^2}\right)\left(\left|V_{\ell,\ell-1}\right|^2 + \left|V_{\ell,\ell+1}\right|^2\right), \qquad (19)$$

$$g_{n,\ell} = \left(\frac{1}{5} + \frac{1}{2\pi^2 n^2} - \frac{21}{\pi^4 n^4}\right)\left(\frac{L}{R_0}\right)^2\left[(\ell+1)\left|V_{\ell,\ell+1}\right|^2 - \ell\left|V_{\ell,\ell-1}\right|^2\right]. \qquad (20)$$

В частности, для штарковского сдвига основного состояния $(n=1;\ \ell=0)$ будем иметь:

$$\Delta E_{1,0}^{(2)} = \frac{q^2}{48E_{1,0}}\left[BL - CL\frac{R_1^3 + R_2^3}{R_1^3 R_2^3}\right]^2 \left[f_{1,0} + g_{1,0}\right], \qquad (21)$$

где $f_{1,0}, g_{1,0}$ теперь имеют следующий вид:

$$f_{1,0} = \frac{1}{3}\left(1 - \frac{15}{\pi^2}\right), \qquad (22)$$

$$g_{1,0} = \frac{1}{3}\left(\frac{1}{5} + \frac{1}{2\pi^2} - \frac{21}{\pi^4}\right)\left(\frac{L}{R_0}\right)^2. \qquad (23)$$

4. Обсуждение результатов

В рамках предложенной модели относительно результатов, полученных в работе, можем заключить следующее:

1. С ростом как "радиального", так и орбитального квантовых чисел, сдвиг уровней очень быстро уменьшается, и реально наибольший физический интерес представляет перестройка основного энергетического уровня. Из (21-23) видно, что при $n=1; \ell=0$ наряду с сугубо "пленочным штарковским фактором" $f_{1,0}=(1-15/\pi^2)/3$ в нашем случае вклад в штарковское смещение вносит также и фактор $g_{1,0}$, и по сравнению с КП [7] штарковский сдвиг основного уровня уменьшается именно на величину

$$g_{1,0}=\frac{1}{3}\left(\frac{1}{5}+\frac{1}{2\pi^2}-\frac{21}{\pi^4}\right)\left(\frac{L}{R_0}\right)^2.$$

Подобное уменьшение сдвига обусловлено тем, что энергия, получаемая частицей от внешнего поля, "расходуется не только на возмущение "радиального" движения, но также и на сообщение частице определенной "центробежной" энергии. Так что в присутствии внешнего поля состояния с нулевым значением орбитального числа во всяком случае будут отсутствовать.

2. Внешнее поле частично снимает вырождение по азимутальному числу, оставляя каждый энергетический уровень двукратно вырожденным по m (исключая уровень с $\ell=0$).

3. Величина сдвига в большой степени зависит от геометрических размеров образца. Эта зависимость обусловлена, с одной стороны, пространственной ограниченностью движения носителей заряда в пределах слоя, а с другой стороны, степенью "сферичности" слоя по отношению к плоско-параллельной пленке, определяемой в нашем случае отношением $\lambda=L/R_0$. В предельном случае $\lambda\to 0$ выражения (21-23) переходят в выражения, аналогичные результатам для Штарк-эффекта в "обычной" квантованной пленке:

$$\Delta E_{1,0}^{(2)}\cong\frac{1}{3}\left(\frac{qFL}{\varepsilon}\right)^2\times\frac{1}{48E_{1,0}}\left(1-\frac{15}{\pi^2}\right).$$

4. Как и в случаях КП и КТ [7,10], размерный Штарк-эффект в слое также характеризуется квадратичной зависимостью от напряженности внешнего поля.

5. Существенная зависимость величины штарковского смещения не только от напряженности внешнего поля, но также от толщины и радиуса слоя, дает возможность, путем варьирования величиной поля и геометрическими размерами образца, добиться желаемого и регулируемого изменения параметров (например, эффективного увеличения-уменьшения ширины запрещенной зоны) той или иной компоненты в композиционных сферических гетероструктурах.

В заключение авторы выражают благодарность С.Л.Арутюняну и А.А.Дживаняну за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. **С.В.Гапоненко**. ФТП, **30**, **577** (1996).
2. **J.W.Haus, H.S.Zhou, I.Honma, H.Komiyama**. Phys. Rev. B, **47**, 1359 (1993).
3. **D.Schooss, A.Mews, A.Eychmuller, H.Weller**. Phys. Rev. B, **49**, 17072 (1994).
4. **A.Mews, A.V.Kadavanich, U.Banin, A.P.Alivasatos**. Phys. Rev. B, **53**, 13242 (1996).
5. **Н.В.Ткач**, ФТТ, **39**, 373 (1997).
6. **Н.В.Ткач, В.А.Головацкий, О.Н.Войцеховская**. ФТП, **34**, 602 (2000).
7. **S.Schmitt-Rink, D.S.Chemia, D.A.B.Miller**. Adv. in Phys., **38**, 89 (1989).
8. **А.И.Екимов, П.А.Скворцов, Т.В.Шубина**. ЖТФ, **59** (3), 202 (1989).
9. **S.Nomura, T.Kobayashi**. Sol. St. Commun., **74**, 1153 (1990)
10. **С.И.Покутний**. ФТП, **34**, 1120 (2000).
11. **Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц**. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М., Наука, 1974.
12. **В.Смайт**. Электростатика и электродинамика. М., ИЛ, 1954.

ՉԱՓԱՅԻՆ ՔՎԱՆՏԱՑՎԱԾ ՇՏԱՐԿ ԷՖԵԿՏԸ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ ԳՆԴԱՅԻՆ ՇԵՐՏՈՒՄ

Վ.Ա. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Հ.Գ. ՍՈՒԼԹԱՆՅԱՆ

Դիտարկված են լիցքակիրների վիճակները քվանտացված գնդային շերտում: Անալիտիկ տեսքով ստացված են արտահայտություններ էներգիական մակարդակների և էլեկտրոնային ալիքային ֆունկցիաների համար: Հաշվարկված է շտարկյան շեղումը և ստացված է նրա կախումը արտաքին դաշտի լարվածությունից և նմուշի երկրաչափական չափերից:

QUANTUM-SIZE STARK-EFFECT IN A SEMICONDUCTOR SPHERICAL LAYER

V.A. HAROUTYUNIAN, H.G. SULTANIAN

States of charge carriers in a guantum spherical layer are considered. The energy spectrum and wave functions for one-electron states are derived in analytical form. Expressions for Stark shift of energy levels and their dependence on the intensity of the external field and geometrical parametres of the layer are obtained.