

УДК 621.315

ВЛИЯНИЕ ОГРАНИЧИВАЮЩЕЙ СРЕДЫ НА ЭНЕРГИЮ СВЯЗИ ВОДОРОДОПОДОБНОЙ ПРИМЕСИ В ТОНКОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ПРОВОЛОКЕ ТИПА A^3B^5

Б.Ж. ПОГОСЯН

Гюмрийский государственный педагогический институт

(Поступила в редакцию 8 февраля 2002 г.)

Рассмотрено влияние окружающей среды на энергию связи водородоподобной примеси в квантовой проволоке A^3B^5 с кейновским законом дисперсии носителей заряда. Вариационным методом вычислены полная энергия и энергия связи водородоподобной примеси, находящейся на оси проволоки из $InSb/GaAs$, в зависимости от радиуса проволоки.

1. Введение

В настоящей работе вариационным методом вычислена энергия связи водородоподобной примеси в квантовой проволоке (КП) типа A^3B^5 в двухзонном приближении кейновского закона дисперсии (ЗД) носителей заряда при учете влияния ограничивающей среды. Аналогичная задача рассмотрена в работе [1] с параболическим ЗД носителей заряда.

2. Теория

Рассмотрим состояния свободного электрона в полупроводниковой проволоке A^3B^5 с круглым сечением радиуса d , ограничивающий потенциал которой имеет вид

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, & \rho < d, \\ V_0, & \rho \geq d. \end{cases} \quad (1)$$

Волновые функции и энергетический спектр электрона определим из уравнений Шредингера в проволоке [2]

$$\left(m^2 s^4 + s^2 \hat{\mathbf{p}}^2 \right) \Psi_{10} = (E_0 + m s^2)^2 \Psi_{10}, \quad (2)$$

и в среде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_{20} + V_0 \Psi_{20} = E_0 \Psi_{20}, \quad (3)$$

где V_0 – величина скачка потенциальной энергии на границе проволоки и ограничивающей среды, m – эффективная масса электрона в проволоке и в среде, s – параметр, характеризующий непараболичность зон ($s \approx 10^8$ см/с для A^3B^5), связанный с шириной запрещенной зоны E_g соотношением $E_g = 2ms^2$, с граничным условием $\Psi_0(d) = 0$.

Нормированное решение рассматриваемой задачи в цилиндрических координатах имеет вид [1]

$$\Psi_0(\rho, \varphi, z) = \begin{cases} N_0 e^{ikz} e^{il\varphi} J_l(r_{nl}\rho), & \rho \leq d, \\ N_0 e^{ikz} e^{il\varphi} \frac{J_l(r_{nl}d)}{K_l(b_{nl}d)} K_l(b_{nl}\rho), & \rho \geq d, \end{cases} \quad (3)$$

где $N_0^{-2} = \pi L d^2 \left(\frac{K_{l-1}(b_{nl}d) K_{l+1}(b_{nl}d) J_l^2(r_{nl}d)}{K_l^2(b_{nl}d)} - J_{l-1}(r_{nl}d) J_{l+1}(r_{nl}d) \right)$ – постоянная нормировки, L – длина проволоки, k, n, l – квантовые числа, J_{nl} – функция Бесселя первого рода порядка l , $r_{nl} = \lambda_{nl}/d$ – параметр, зависящий от энергии электрона ($r_{nl} = \sqrt{E_0(E_0 + E_g)/\hbar^2 s^2 - k^2}$), $b_{nl} = \sqrt{2m(V_0 - E_0)/\hbar^2 + k^2}$, λ_{nl} – n -ый корень функции Бесселя порядка l .

Для энергетического спектра электрона, из условия непрерывности логарифмических производных волновых функций в точке $\rho = d$, находим

$$E_0 = -ms^2 + \sqrt{m^2 s^4 + \hbar^2 s^2 (k^2 + r_{10}^2)} = \frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - b_{10}^2) + V_0. \quad (4)$$

Уравнения для определения состояний электрона внутри полупроводниковой проволоки A^3B^5 и в среде, под действием неподвижного кулоновского центра, локализованного на оси проволоки, с потенциалом

$$U(\rho, z) = -\frac{e^2}{\chi \sqrt{\rho^2 + z^2}}$$

имеют вид

$$\left(m^2 s^4 + s^2 \hat{p}^2 \right) \Psi = (\varepsilon + U(\rho, z))^2 \Psi, \quad (5)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V_0 \Psi - U(\rho, z) \Psi = E \Psi, \quad (6)$$

где $\varepsilon = E + ms^2$.

Для определения состояний водородоподобной примеси воспользуемся вариационным методом, развитым в [1]. Пробную волновую

функцию для основного состояния ($n=0, l=0$) выберем в виде

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = \begin{cases} Ne^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} J_0(r_{10}\rho), & \rho \leq d, \\ Ne^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} \frac{J_0(r_{10}d)}{K_0(b_{10}d)} K_0(b_{10}\rho), & \rho \geq d, \end{cases} \quad (7)$$

где λ – вариационный параметр, $N^{-2} = -2\pi(d/d\lambda)(H+M)$ – постоянная нормировки, $K_0(2\lambda\rho)$ – модифицированная функция Бесселя второго рода.

Для среднего значения оператора кинетической энергии находим

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m} - \frac{\pi \hbar^2 N^2}{m} \left(r_{10}^2 \frac{dH}{d\lambda} - b_{10}^2 \frac{dM}{d\lambda} \right), \quad (8)$$

а для среднего значения оператора потенциальной энергии получаем

$$\langle V_e \rangle = -\frac{4\pi N^2 e^2}{\chi} \left(\frac{\varepsilon}{ms^2} H + M \right) - 2\pi N^2 V_0 \frac{dM}{d\lambda} + \frac{4\pi \lambda N^2 e^4}{ms^2 \chi^2} G, \quad (9)$$

где

$$H = \int_0^d J_0^2(r_{10}\rho) K_0(2\lambda\rho) \rho d\rho, \quad M = \frac{J_0^2(r_{10}d)}{K_0^2(b_{10}d)} \int_d^\infty K_0^2(b_{10}\rho) K_0(2\lambda\rho) \rho d\rho,$$

$$G = \int_0^d J_0^2(\alpha_{10}\rho) K_0(2\lambda\rho) {}_1F_2(1; 1/2, 3/2; \lambda^2 \rho^2) \rho d\rho + \\ + 2\lambda \int_0^d J_0^2(\alpha_{10}\rho) K_1(2\lambda\rho) {}_1F_2(1; 3/2, 3/2; \lambda^2 \rho^2) \rho^2 d\rho,$$

${}_p F_q(a_1, \dots, a_p; b_1, \dots, b_q; z)$ – обобщенная гипергеометрическая функция.

Энергия связи примеси определяется как разность энергии основного состояния системы без примеси, т.е. E_0 , и энергии $E_1(d) = \langle T \rangle + \langle V_e \rangle$ основного состояния с примесью: $E_b(d) = E_0(d) - E_1(d)$.

3. Обсуждение результатов

В численных расчетах, проведенных для проволоки из InSb в ограничивающей среде из GaAs (рис.1.1), использованы следующие значения параметров: энергия Ридберга $E_R = 0.6 \cdot 10^{-3}$ eV, борковский радиус $a_B = 500$ Å, масса электрона в проволоке $m = 0.016m_0$, $V_0 = (E_{g2} - E_{g1})Q$ ($Q = 0.6$ – доля разрыва потенциальной энергии, приходящаяся на зону проводимости). Для сравнения приведена кривая 2 для проволоки GaAs в ограничивающей среде из AlAs [1].

Как следует из полученных зависимостей (рис.1), учет непараболичности ЗД носителей заряда приводит к значительному уменьшению полной энергии водородоподобной примеси. Последнее обусловлено тем обстоятельством, что в случае квадратичного ЗД $E \sim P^2$, а при кейновском ЗД $E \sim P$. С другой стороны, согласно соотношению неопределенностей $P \sim 1/d$. Отсюда ясно, что с увеличением P (уменьшением d) энергия растет быстрее при квадратичном ЗД, чем при кейновском. Аналогичная ситуация рассмотрена в работе [3].

Как следует из полученных зависимостей (рис.2), учет непараболичности ЗД носителей заряда приводит к значительному увеличению энергии связи водородоподобной примеси в тонкой проволоке A^3B^5 (рис.2.2) по сравнению с аналогичной величиной в проволоке со стандартной дисперсией (рис.2.1) [1]. Это увеличение существенно при толщинах проволоки, меньших боровского радиуса a_B примесного электрона ($d/a_B < 1$).

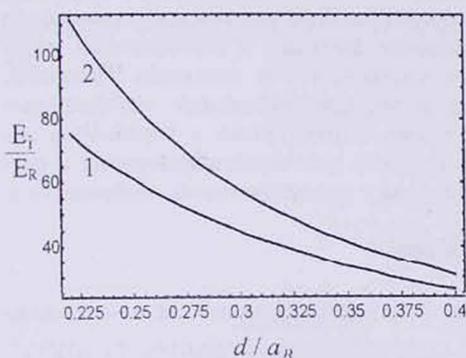


Рис.1. Зависимость полной энергии основного состояния водородоподобной примеси от d/a_B .

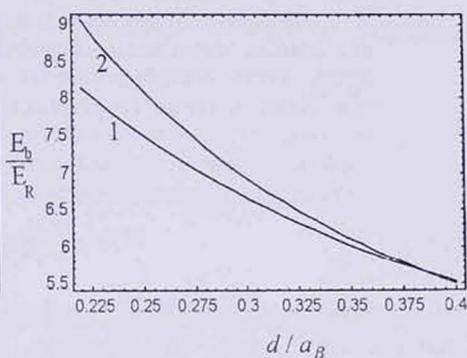


Рис.2. Зависимость энергии связи основного состояния водородоподобной примеси от d/a_B .

Возрастание энергии связи основного состояния примеси в кейновском полупроводнике можно объяснить возникновением дополнительного притяжения к примесному центру, обусловленным непараболичностью [2].

ЛИТЕРАТУРА

1. J.W.Brown, H.N.Spector. J. Appl. Phys., **59**, 1179 (1986).
2. А.А.Аветисян, А.Р.Джотян, Е.М.Казарян, В.Ж.Погосян. Phys. Stat. Sol.(b), **218**, 441 (2000).
3. А.А.Аветисян, Э.М.Казарян, А.А.Саркисян. Изв. НАН Армении, Физика, **35**, 250 (2000).