Известия НАН Армении, Физика, т.39, №6, с.384-388 (2004)

УДК.621.315

СОСТОЯНИЯ ЧАСТИЦЫ С ЗАВИСЯЩЕЙ ОТ ПОЛОЖЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОЙ МАССОЙ В КВАНТОВОЙ ЯМЕ

А.Х. МАНАСЕЛЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 5 августа 2004 г.)

Исследовано влияние координатной зависимости эффективной массы носителя заряда на уровни энергии и волновые функции основного и нескольких возбужденных состояний в параболической квантовой яме. Показано, что учет этой зависимости приводит к понижению уровней энергии и "выталкиванию" волновых функций из центральной области квантовой ямы. Численные расчеты проведены для системы $Ga_{0.7}Al_{0.3}As/Ga_{1-r}Al_rAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As (0 \le x \le 0.3).$

1. Введение

Низкоразмерные электронные системы, в которых реализуется квантовый режим поведения носителей заряда (H3), весьма чувствительны к изменениям их размеров, геометрической формы и состава [1]. Для понимания происходящих в низкоразмерных полупроводниковых гетероструктурах физических процессов и для конкретных расчетов характеристик таких систем необходимо адекватное описание электронных состояний в них, что весьма важно как с точки зрения прикладных применений низкоразмерных полупроводниковых систем, так и фундаментальной науки.

В работах [2-6] рассмотрены одномерные системы с зависящей от координаты эффективной массой НЗ. Так, в [2] исследованы граничные условия для волновой функции в таких системах, в [3,4] рассмотрены точно решаемые задачи, когда эффективная масса электрона и ограничивающий квантовую яму (КЯ) потенциал меняются по закону гиперболического тангенса. В работах [7-9] изложен метод суперсимметрии в квантовой механике для частиц с зависящей от координаты эффективной массой, с помощью которого для заданной зависимости массы можно найти виды потенциалов, для которых уравнение Шредингера имеет точные решения. Однако эти потенциалы не всегда имеют реальный физический смысл.

В настоящее время наиболее распространены модели КЯ с прямоугольным и параболическим ограничивающим потенциалами [10]. Последний можно осуществить методом плавного изменения концентрации сплава в гетероструктуре [11]. В модели прямоугольной КЯ электрону приписывается постоянная эффективная масса, однако в случае параболической ямы такой подход эквивалентен пренебрежению зависимостью эффективной массы от положения, что а priori не очевидно и не обосновано.

В данной работе рассмотрены электронные состояния H3 в полупроводниковой KЯ, где концентрация сплава и, следовательно, эффективная масса и ограничивающий потенциал меняются по квадратичному закону. С помощью приближенного метода получены энергетические уровни и волновые функции электрона для основного и нескольких возбужденных состояний.

2. Электронные состояния в КЯ

Рассмотрим КЯ из $Ga_{1-x_{max}}Al_{x_{max}}As/Ga_{1-x}Al_{x}As/Ga_{1-x_{max}}Ga_{1-x_{max}}As$, где концентрация сплава x зависит от координаты z по закону $\varphi(z)$. Тогда эффективная масса электрона и потенциальная энергия могут быть представлены в виде

$$m(z) = m_1 [1 + f(z)] \quad \text{M} \quad V(z) = A\varphi(z), \tag{1}$$

где $m_1=0.067m_0$ – эффективная масса электрона в GaAs, $f(z)=83x/67=83\varphi(z)/67$, A – постоянный коэффициент. Уравнение Шредингера для электрона в КЯ имеет вид

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} - \frac{1}{1+f(z)}\frac{df}{dz}\frac{d\psi}{dz} + [1+f(z)]\left[k_*^2 - \lambda^2\varphi(z)\right]\psi = 0,$$
(2)

где $k_w^2 = 2m_1 E / \hbar^2$, $\lambda^2 = 2m_1 A / \hbar^2$. Решение уравнения (2) будем искать в виде

$$\psi(z) = \left[1 + f(z)\right]^{1/2} U(z) , \qquad (3)$$

где U(z) - новая функция, удовлетворяющая уравнению

$$\frac{d^2U}{dz^2} + \left[\frac{1}{2(1+f)}\frac{d^2f}{dz^2} - \frac{3}{4(1+f)^2}\left(\frac{df}{dz}\right)^2 + (1+f)(k_w^2 - \lambda^2\varphi)\right]U = 0.$$
(4)

Предположим теперь, что концентрация x(z) в яме меняется от 0 до x_{\max} по квадратичному закону, т.е.

$$x(z) = \begin{cases} 4x_{\max} z^2 / a^2, & |z| \le a/2, \\ x_{\max}, & |z| > a/2, \end{cases}$$
(5)

где a – ширина КЯ. Тогда $f(z)=\alpha z^2$, где $\alpha = (83/67)(4x_{max}/a^2)$ и в области ямы уравнение (4) приводится к виду

$$\frac{d^2U}{dz^2} + \frac{\alpha(1 - 2\alpha z^2)}{(1 + \alpha z^2)^2} U + (1 + \alpha z^2)(k_w^2 - \lambda^2 z^2)U = 0, \qquad (6)$$

где $\lambda^2 = 8m_1V_0 / \hbar^2 a^2$, $V_0 = 1.247Q_e x_{max}$ эВ – высота барьера потенциальной энер-

гии, $Q_e = 0.6 - доля разрыва потенциальной энергии, приходящаяся на зону проводимости, <math>m_2 - эффективная масса электрона вне ямы. Уравнение (6) не решается аналитически, однако для небольших <math>x_{max} \le 0.3$ в нем можно с достаточно хорошей точностью пренебречь членами порядка $(\alpha z^2)^2$ и выше. В результате вместо уравнения (6) получим уравнение

$$\frac{d^2 U}{dz^2} + (A^2 - B^2 z^2)U = 0, \qquad (7)$$

совпадающее с уравнением для гармонического осциллятора [12] с параметрами $A^2 = k_w^2 + \alpha$ и $B^2 = \lambda^2 - k_w^2 \alpha + 4\alpha^2$. Решением (7) являются функции

$$U(z) = C_1 e^{-\frac{1}{2}Bz^2} F\left(\frac{1}{4} - \frac{A^2}{4B}, \frac{1}{2}, Bz^2\right) -$$
Для четных состояний, (8)

$$U(z) = C_1 \sqrt{B} z e^{-\frac{1}{2}Bz^2} F\left(\frac{3}{4} - \frac{A^2}{4B}, \frac{3}{2}, Bz^2\right) - \text{для нечетных состояний,}$$
(9)

где F(a,b,z) – вырожденная гипергеометрическая функция.

Общая волновая функция системы будет иметь вид

$$\begin{split} \psi(z) &= C_1 \begin{cases} C_2 e^{k_b z}, & z < -a/2, \\ (1 + \alpha z^2)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}Bz^2} F\left(\frac{1}{4} - \frac{A^2}{4B}, \frac{1}{2}, Bz^2\right), |z| \leq a/2, \text{ для четных состояний, } ^{(10)} \\ C_2 e^{-k_b z}, & z > a/2, \end{cases} \\ \psi(z) &= C_1 \begin{cases} C_2 e^{k_b z}, & z < -a/2, \\ (1 + \alpha z^2)^{1/2} \sqrt{B} z e^{-\frac{1}{2}Bz^2} F\left(\frac{3}{4} - \frac{A^2}{4B}, \frac{3}{2}, Bz^2\right), |z| \leq a/2, \text{ для нечетных состояний, } \\ -C_2 e^{-k_b z}, & z > a/2, \end{cases} \end{split}$$

где $k_w^2 = 2m_2(V_0 - E/\hbar^2)$, и C_1 и C_2 – известные постоянные нормировки.

Энергетический спектр определяется из условия непрерывности логарифмической производной волновой функции на границе z = a/2. Для четных и нечетных состояний получим, соответственно,

$$-k_{b} = \frac{2\alpha a}{4 + \alpha a^{2}} - \frac{Ba}{2} + \frac{a}{2} \left(B - A^{2}\right) \frac{F\left(\frac{5}{4} - \frac{A^{2}}{4B}, \frac{3}{2}, B\frac{a^{2}}{4}\right)}{F\left(\frac{1}{4} - \frac{A^{2}}{4B}, \frac{1}{2}, B\frac{a^{2}}{4}\right)},$$
(12)

$$-k_{b} = \frac{2\alpha a}{4 + \alpha a^{2}} + \frac{2}{a} - \frac{Ba}{2} + \frac{a}{2} \left(B - \frac{A^{2}}{3} \right) \frac{F\left(\frac{7}{4} - \frac{A^{2}}{4B}, \frac{5}{2}, B\frac{a^{2}}{4}\right)}{F\left(\frac{3}{4} - \frac{A^{2}}{4B}, \frac{3}{2}, B\frac{a^{2}}{4}\right)}$$
(13)

3. Обсуждение результатов

Численные расчеты проведены для квантовой ямы $Ga_{0,7}AI_{0,3}As/Ga_{1-x}AI_xAs/Ga_{0,7}AI_{0,3}As$. В расчетах энергии выражены в единицах эффективной ридберговской энергии E_R , а все длины – в единицах эффективного боровского радиуса a_B (для GaAs $E_R = 5.2$ мэB, $a_B = 104$ Å [11]).



Рис.1. Зависимость энергетических уровней от ширины КЯ.

На рис.1 представлены зависимости электронных энергетических уровней от ширины КЯ. Для сравнения пунктирными линиями представлены электронные уровни с постоянной эффективной массой электрона т. Как видно из рис.1, учэт зависимости эффективной массы от положения в КЯ приводит к смещению уровней в область низких энергий. При этом, чем выше энергетический уровень, тем больше величина этого смещения. Однако, как видно из рисунка, для значений ширины ямы а≤0.22 a, энергия основного состояния электрона с эффективной массой *m*₁ меньше, чем то же с учетом координатной зависимости эффективной массы. Это объясняется тем, что для малых значений а электрон с меньшей эффективной массой больше просачивается в область барьера. При увеличении ширины КЯ эффект барьера уменьшается, и энергия электрона с зависящей от положения массой понижается. Например, для а =1.5 ав относительное изменение энергии для основного состояния составляет около 9% (абсолютное – 0.79 E_R), для первого возбужденного состояния - 9.1% (2.35 E_R), а для второго возбужденного состояния – 8.7% (3.5 E_R).

На рис.2 представлены зависимости разности плотности вероятности с постоянной эффективной массой m_1 и с зависящей от координаты массой (1) в КЯ с $a = 1.5 a_B$, для основного состояния (n=1) и для первого возбужденного состояния (n=2). Для основного состояния учет зависимости массы от положения приводит к уменьшению вероятности нахождения электрона в центральной части КЯ ($\Delta |\psi_1|^2 > 0$). Это объясняется тем, что при удалении от центральной части частица становится тяжелее и больше времени проводит

вдали от центра. Для возбужденного состояния максимумы вероятности смещаются в сторону больших |z| и несколько понижаются $(\Delta |\psi_2|^2 > 0$, когда $0 \le z \le 0.4$, и $\Delta |\psi_2|^2 > 0$, когда $0.4 \le z \le 0.8$).



Рис.2. Зависимость разности плотности вероятности от координаты в КЯ.

Выражаю благодарность проф. А.А.Киракосяну за предложение темы и помощь при выполнении работы. Работа выполнена в рамках государственной целевой программы Республики Армения "Полупроводниковая наноэлектроника" и при поддержке гранта ANSEF 04-ps-condmatth 813-95.

ЛИТЕРАТУРА

- G.Bastard. Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures. Les editions de Physique. Les Ulis, Cedex, France, 1988.
- 2. M.E.Pistol. Phys. Rev. B, 60, 14269 (1999).
- 3. L.Dekar, L.Chetouani, T.F.Hammann. J. Math. Phys., 39, 2551 (1998).
- 4. L.Dekar, L.Chetouani, T.F.Hammann. Phys. Rev. A, 59, 107 (1999).
- 5. R.Koc, M.Koca. J. Phys. A: Math. Gen., 36, 8105 (2003).
- 6. N.Moiseyev, R.Lefebvre. Phys. Rev. A, 64, 052711 (2001).
- 7. A.R. Plastino, A.Rigo, M.Casas, F.Garcias, A.Plastino. Phys. Rev. A, 60, 4318 (1999).
- 8. B.Gonul, B.Gonul, D.Tutcu, O.Ozer. Mod. Phys. Lett. A, 17, 2057 (2002).
- 9. A.De Souza Dutra, M.Hott, C.A.S.Almeida. EuroPhys. Lett., 62, 8 (2003).
- 10. P.Harrison. Quantum wells, wires, and dots. John Wiley & Sons, New York, 1999.
- 11. S.Adachi. J. Appl. Phys., 58, R1 (1985).
- 12. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. М., Наука, 1989.

STATES OF PARTICLE WITH POSITION-DEPENDENT EFFECTIVE MASS IN A QUANTUM WELL

A. KH. MANASELYAN

The influence of effective mass position dependence of a charge carrier on the energy levels and wave functions of ground and excited states is calculated for a quantum well with parabolic confinement. It is shown that the account of this dependence results in the decrease of energy levels and the "ejection" of wave functions from the central region of the well. The numerical calculations are carried out for $Ga_{0.7}Al_{0.3}As/Ga_{1.7}Al_{0.3}As/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ ($0 \le x \le 0.3$) system.