

УДК 621.315

ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ ВОДОРОДОПОДОБНОЙ ПРИМЕСИ В КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ С ВЫПУКЛЫМ ДНОМ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

А.Х. МАНАСЕЛЯН, А.А. КИРАКОСЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 11 февраля 2005 г.)

В рамках приближения эффективной массы, вариационным методом рассчитаны электронные и примесные состояния в сферической квантовой точке с выпуклым дном в магнитном поле. Расчеты проведены для примеси, находящейся в центре квантовой точки. Получены зависимости энергии связи примеси от радиуса КТ, меры изогнутости дна квантовой ямы и индукции магнитного поля для системы из $Ga_{1-x}Al_xAs/Ga_{1-y}Al_yAs$.

1. Введение

В последние годы резко возросло число работ, посвященных исследованию свойств квантовых точек (КТ), содержащих водородоподобные примесные центры [1-4]. Такие КТ широко используются в оптоэлектронных устройствах и в полупроводниковых лазерных системах, поэтому исследование примесных состояний и их влияния на кинетические и оптические процессы в КТ имеют не только чисто научное, но и большое прикладное значение.

Во многих работах [5-14] рассмотрены электронные и примесные состояния в КТ, имеющих различные геометрические формы и ограничивающие потенциалы и найдены энергии связи примеси, когда она находится в центре КТ. Исследованию влияния магнитного поля на электронные и примесные состояния в КТ посвящены работы [15-24]. Согласно полученным результатам, для примеси, находящейся в центре КТ, увеличение магнитной индукции приводит к росту энергии связи.

В данной работе, в рамках метода эффективной массы вариационным методом рассчитана энергия связи водородоподобной примеси в сферической КТ с изогнутым дном в магнитном поле, когда примесь находится в центре КТ. Конкретный профиль дна КТ обеспечивается условиями выращивания. Так, выпуклости дна квантовой ямы из $Ga_{1-x}Al_xAs/Ga_{1-y}Al_yAs$ можно добиться плавным изменением концентрации сплава y от максимального значения в центре КТ до нулевого значения на границе квантовой ямы.

2. Электронные состояния

Рассмотрим квантовую точку с выпуклым дном в магнитном поле. Для упрощения расчетов пренебрежем разницей эффективной массы электрона в КТ и в окружающей среде, а также диэлектрической неоднородностью системы. Гамильтониан электрона в рассматриваемой системе

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{P}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(r), \quad (1)$$

где m — эффективная масса электрона, $\mathbf{A}$ — вектор-потенциал магнитного поля, а ограничивающий потенциал

$$V(r) = \begin{cases} U_0 \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right), & r \leq R, \\ V_0 & r > R. \end{cases} \quad (2)$$

Для однородного магнитного поля $\mathbf{B}(0,0,B)$, направленного вдоль оси z , вектор-потенциал выберем в виде $\mathbf{A} = [\mathbf{Br}]/2$. Тогда уравнение Шредингера будет иметь вид

$$\left[-\nabla^2 - i \frac{eB}{\hbar} + \frac{1}{4} \left(\frac{eB}{\hbar} \right)^2 r^2 \sin^2 \theta \right] \psi + \frac{2m}{\hbar^2} [V(r) - E] \psi = 0. \quad (3)$$

Введем магнитную длину $l_B = (\hbar/eB)^2$, эффективный боровский радиус $a_B = \hbar^2 \chi / me^2$, эффективную ридберговскую энергию $E_R = me^4 / 2\hbar^2 \chi^2$ (χ — диэлектрическая постоянная системы) и следующие безразмерные параметры: $x = r/a_B$, $\varepsilon = E/E_R$, $v = V/R_R$, $a = R/a_B$, $v_0 = V_0/E_R$, $u_0 = U_0/E_R$, $\gamma = a_B^2/l_B^2$. После перехода к безразмерным параметрам уравнение Шредингера примет вид

$$\left[-\nabla^2 - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{4} \gamma^2 x^2 \sin^2 \theta \right] \psi + v(x) \psi = \varepsilon \psi. \quad (4)$$

В отсутствие магнитного поля ($\gamma = 0$) решение уравнения (4) для основного состояния дается выражением

$$\psi_0(x) = C_1 \begin{cases} e^{-\frac{1}{2} i \lambda x^2} F\left(\frac{3}{4} + \frac{i k_w^2}{4\lambda}, \frac{3}{2}; i \lambda x^2\right), & x \leq a, \\ C_2 \frac{1}{x} e^{-k_b x}, & x > a, \end{cases} \quad (5)$$

где введены обозначения: $k_w = (\varepsilon - u_0)^{1/2}$, $k_b = (v_0 - \varepsilon)^{1/2}$, $\lambda = (u_0/a^2)^{1/2}$,

$$C_1 = \left\{ \int_0^a \left| F\left(\frac{3}{4} + \frac{i k_w^2}{4\lambda}, \frac{3}{2}; i \lambda x^2\right) \right|^2 x^2 dx + \frac{|C_2|^2}{2k_b} e^{-2k_b a} \right\}^{-1/2}, \quad C_2 = a e^{-k_b a} e^{-\frac{1}{2} i \lambda a^2} F\left(\frac{3}{4} + \frac{i k_w^2}{4\lambda}, \frac{3}{2}; i \lambda a^2\right), \quad (6)$$

а $F(a, b; z)$ – вырожденная гипергеометрическая функция [25]. Энергию основного состояния ε_0 определим из условия непрерывности логарифмической производной волновой функции на границе квантовой точки ($x=a$):

$$i\lambda a - i\lambda a \left(1 + \frac{ik_w^2}{3\lambda}\right) \frac{F\left(\frac{7}{4} + \frac{ik_w^2}{4\lambda}, \frac{5}{2}; i\lambda a^2\right)}{F\left(\frac{3}{4} + \frac{ik_w^2}{4\lambda}, \frac{3}{2}; i\lambda a^2\right)} = \frac{1}{a} + k_b. \quad (7)$$

При наличии магнитного поля ($\gamma \neq 0$), пользуясь предложенным в [26] улучшенным вариационным методом, вариационную волновую функцию представим в виде

$$\psi_1(x, \theta) = N_1 e^{-\beta x} e^{\frac{1}{4}\gamma x^2 \sin^2 \theta} \begin{cases} e^{-\frac{1}{2}i\lambda x^2} F\left(\frac{3}{4} + \frac{ik_w^2}{4\lambda}, \frac{3}{2}; i\lambda x^2\right), & x \leq a, \\ C_2 \frac{1}{x} e^{-k_b x}, & x > a, \end{cases} \quad (8)$$

где β – вариационный параметр, $N_1 = (2\pi A_1)^{-1/2}$ – коэффициент нормировки,

$$A_1 = \left(\frac{2\pi}{\gamma}\right)^{1/2} \int_0^a x e^{-2\beta x} e^{-\gamma x^2/2} \operatorname{erfi}\left[\left(\frac{\gamma}{2}\right)^{1/2} x\right] F\left(\frac{3}{4} + \frac{ik_w^2}{4\lambda}, \frac{3}{2}; i\lambda x^2\right)^2 dx + \\ + \left(\frac{2\pi}{\gamma}\right)^{1/2} |C_2|^2 \int_a^\infty e^{-2\beta x} e^{-\gamma x^2/2} e^{-2k_b x} \operatorname{erfi}\left[\left(\frac{\gamma}{2}\right)^{1/2} x\right] \frac{dx}{x}, \quad (9)$$

$\operatorname{erfi}(z)$ – комплексный интеграл ошибок [25].

Энергия электрона в основном состоянии дается формулой

$$\varepsilon_1 = 2\pi \int_0^\pi \int_0^a \psi_1^* \hat{H}_0 \psi_1 x^2 \sin \theta dx d\theta + 2\pi \int_a^\infty \int_0^\pi \psi_1^* \hat{H}_0 \psi_1 x^2 \sin \theta dx d\theta, \quad (10)$$

откуда, воспользовавшись гамильтонианом (1) и выражением для волновой функции (8), получим

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_0 + \beta^2 + \gamma + \frac{D_1 + D_2}{A_1}, \quad (11)$$

где

$$D_1 = i\lambda \int_0^a x e^{-2\beta x} \left\{ \left(\frac{2\pi}{\gamma}\right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\gamma x^2} (\gamma x^2 + 1) \operatorname{erfi}\left[\left(\frac{\gamma}{2}\right)^{1/2} x\right] - 2x \right\} f(x) dx, \quad (12)$$

$$D_2 = -|C_2|^2 \int_a^\infty \frac{1}{x^2} e^{-2\beta x} e^{-2k_b x} \left(\frac{1}{x} + k_b\right) \left\{ \left(\frac{2\pi}{\gamma}\right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\gamma x^2} (\gamma x^2 + 1) \operatorname{erfi}\left[\left(\frac{\gamma}{2}\right)^{1/2} x\right] - 2x \right\} dx, \quad (13)$$

$$f(x) = \left(1 + \frac{ik_w^2}{3\lambda}\right) F\left(\frac{3}{4} - \frac{ik_w^2}{4\lambda}, \frac{3}{2}; -i\lambda x^2\right) F\left(\frac{7}{4} + \frac{ik_w^2}{4\lambda}, \frac{5}{2}; i\lambda x^2\right) - \left|F\left(\frac{3}{4} + \frac{ik_w^2}{4\lambda}, \frac{3}{2}; i\lambda x^2\right)\right|^2. \quad (14)$$

3. Примесные состояния

Рассмотрим квантовую точку с выпуклым дном, в центре которой находится заряженный водородоподобный примесный центр. В этом случае следует в гамильтониане (1) добавить потенциальную энергию взаимодействия электрона с примесью $V_{imp}(r) = -r^2/\chi r$. Уравнение Шредингера с гамильтонианом (1) в безразмерных параметрах примет вид

$$\left[-\nabla^2 - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{4}\gamma^2 x^2 \sin^2 \theta + v(x) - \frac{2}{x}\right] \psi = \varepsilon \psi. \quad (15)$$

Выберем вариационную волновую функцию основного состояния в виде

$$\psi_1^{imp}(x, \theta) = N_2 e^{-\beta_2 x} e^{-\frac{1}{4}\gamma x^2 \sin^2 \theta} \begin{cases} e^{-\frac{1}{2}i\lambda x^2} F\left(\frac{3}{4} + \frac{ik_w^2}{4\lambda}, \frac{3}{2}; i\lambda x^2\right), & x \leq a, \\ C_2 \frac{1}{x} e^{-k_2 x}, & x > a, \end{cases} \quad (16)$$

где β_2 — вариационный параметр, $N_2 = (2\pi A_2)^{-1/2}$, а коэффициент A_2 дается выражением (9) с заменой в нем β на β_2 . С помощью (15) и (16) для энергии основного состояния при наличии примеси получим выражение

$$\varepsilon_1^{imp} = \varepsilon_0 + \beta_2^2 + \gamma + \frac{D_1' + D_2'}{A_2} - 2 \frac{G_1' + G_2'}{A_2}, \quad (17)$$

где D_1' и D_2' даются соответственно выражениями (12) и (13) с заменой β на β_2 ,

$$G_1' = \left(\frac{2\pi}{\gamma}\right)^{1/2} \int_0^a e^{-2\beta_2 x} e^{-\gamma x^2/2} \operatorname{erfi}\left[\left(\frac{\gamma}{2}\right)^{1/2} x\right] F\left(\frac{3}{4} + \frac{ik_w^2}{4\lambda}, \frac{3}{2}; i\lambda x^2\right)^2 dx, \quad (18)$$

$$G_2' = \left(\frac{2\pi}{\gamma}\right)^{1/2} |C_2|^2 \int_a^\infty e^{-2\beta_2 x} e^{-\gamma x^2/2} e^{-2k_2 x} \operatorname{erfi}\left[\left(\frac{\gamma}{2}\right)^{1/2} x\right] \frac{dx}{x^2}. \quad (19)$$

Энергию связи определим как разность энергий электрона в КТ без примеси и с примесью: $\varepsilon_b = \varepsilon_1 - \varepsilon_1^{imp}$.

4. Обсуждение результатов

Численные расчеты проведены для системы из GaAs/Ga_{1-y}Al_yAs, со значениями параметров $m = 0.067m_0$ (m_0 — масса свободного электрона), $\chi = 13.18$, $E_R = 5.2$ мэВ, $a_B = 104$ Å, $v_0 = 50$ (концентрация сплава $x \approx 0.35$) [27]. Для GaAs значению $\gamma = 1$ соответствует магнитное поле с индукцией $B = 6$ Т.

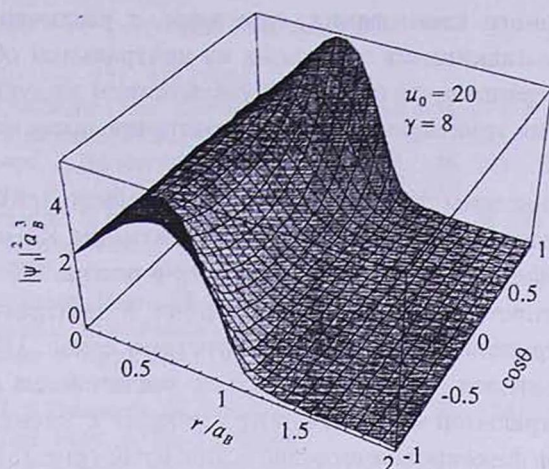


Рис.1. Плотность вероятности для основного состояния.

На рис.1 представлены графики безразмерной плотности вероятности в зависимости от расстояния r и $\cos \theta$ (θ – азимутальный угол) для различных значений магнитного поля и параметра выпуклости дна КТ u_0 в отсутствие примесного центра. Как видно из рисунка, выпуклость дна КТ приводит к смещению максимума плотности вероятности из центральной части КТ. Из-за магнитного квантования электрон локализуется в плоскости, перпендикулярной направлению магнитного поля. Конкуренция этих тенденций приводит к тому, что электрон с наибольшей вероятностью локализуется возле границы КТ вблизи оси z ($\cos \theta \approx \pm 1$).

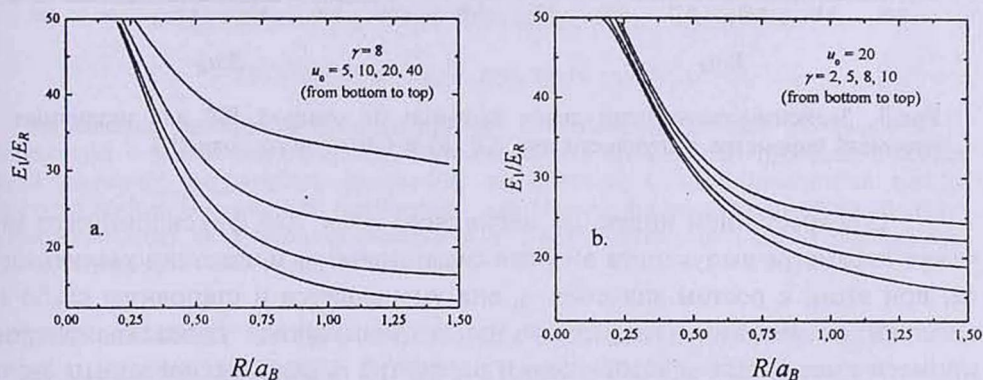


Рис.2. Зависимость энергии основного состояния от радиуса КТ для различных значений параметра выпуклости дна КТ (а) и магнитного поля (б).

На рис.2 представлены зависимости энергии основного состояния электрона от радиуса КТ при различных значениях u_0 и индукции магнитного поля. При фиксированном значении индукции магнитного поля ($\gamma = 8$, рис.2а) с увеличением радиуса КТ уровень энергии понижается из-за умень-

шения роли размерного квантования, при этом, с увеличением u_0 энергия повышается из-за выталкивания электрона из центральной области КТ. При фиксированном значении $u_0=20$ (рис.2b) с увеличением индукции магнитного поля уровень энергии повышается из-за возрастания роли магнитного квантования.

На рис.3 приведены зависимости энергии связи примеси от радиуса КТ при различных значениях параметра выпуклости дна КТ и индукции магнитного поля в случае, когда примесь находится в центре КТ. С увеличением радиуса КТ вероятность нахождения электрона в центральной части КТ уменьшается, что приводит к уменьшению энергии связи. При фиксированном значении магнитного поля $\gamma=8$ (рис.3a) с увеличением u_0 электрон выталкивается из центральной части КТ, что приводит к уменьшению энергии связи примеси. Для фиксированного значения $u_0=20$ (рис.3b) с увеличением индукции магнитного поля усиливается роль магнитного квантования, и энергия связи примеси увеличивается.

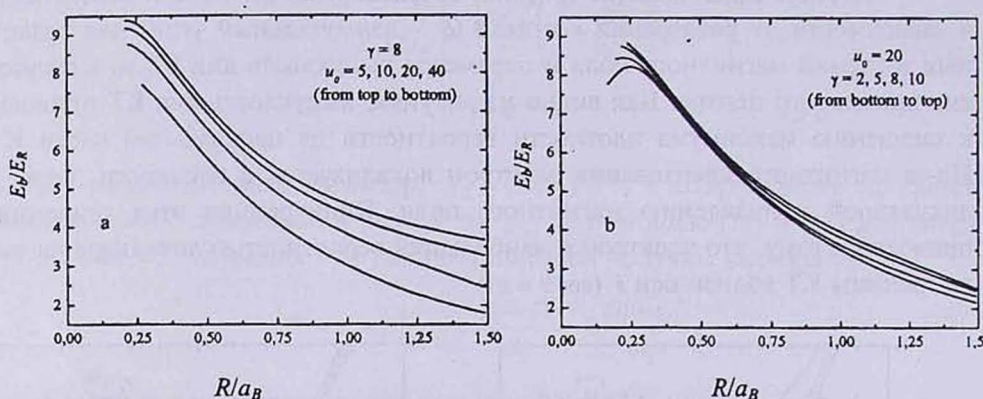


Рис.3. Зависимость энергии связи примеси от радиуса КТ для различных значений параметра выпуклости дна КТ (a) и магнитного поля (b).

С возрастанием индукции магнитного поля, для фиксированного значения параметра выпуклости энергия связи примеси монотонно увеличивается, при этом, с ростом значения u_0 она уменьшается и становится слабо зависящей от индукции магнитного поля. Аналогичное поведение энергии примеси имеет место при изменении параметра u_0 для фиксированных значений индукции магнитного поля. Такое поведение энергии связи примеси обусловлено вытеснением электрона из центральной области КТ, что усиливается как с ростом выпуклости дна, так и с ослаблением магнитного поля.

Работа выполнена в рамках государственной целевой программы Республики Армения "Полупроводниковая наноэлектроника" и при поддержке гранта ANSEF 04-ps-condmatth 813-95.

1. A.P. Alivasatos, Science, 271, 933 (1996).
2. T. Chakraborty. Quantum Dots. Elsevier science, Amsterdam/New York, 1999.
3. M.A. Cusack, P.R. Briddon, M. Jaros. Physica B, 253, 10 (1998).
4. M. Pacheco, A. Leon, Z. Barticevic. Phys. Stat. Sol. (b), 146, 235 (2003).
5. J.L. Zhu, J.J. Xiong, B.L. Gu. Phys. Rev. B, 41, 6001 (1990).
6. N. Porras-Montenegro, S.T. Peres-Merchancano. Phys. Rev. B, 46, 9780 (1992).
7. D.S. Chuu, C.M. Hsiao, W.N. Mei. Phys. Rev. B, 46, 3898 (1992).
8. H. Paredes-Gutiérrez, J.C. Cuero-Yepes, N. Porras-Montenegro. J. Appl. Phys., 75, 5150 (1994).
9. C.Y. Hsieh. Chin. Journ. Phys., 38, 478 (2000).
10. Y.P. Varshni. Superlatt. Microstruct., 29, 233 (2001).
11. M.C. Lin, D.S. Chuu. J. Appl. Phys., 90, 2886 (2001).
12. A.X. Манаселян, А.А. Киракосян. Изв. НАН Армении, Физика, 38, 87 (2003).
13. E.M. Kazaryan, L.S. Petrosyan, H.A. Sarkisyan. Phys. E, 16, 174 (2003).
14. X.Z. Yuan, K.D. Zhu. Phys. E, 25, 93 (2004).
15. G. Li, S.V. Brans, K.K. Bajaj. Phys. Rev. B, 47, 15735 (1993).
16. Z. Xiao, J. Zhu, F. He. J. Appl. Phys., 79, 9181 (1996).
17. J.M. Ferreyra, P. Bosshard, C.R. Proetto. Phys. Rev. B, 55, 13682 (1997).
18. F.J. Ribeiro, A. Latge, M. Pacheco, Z. Barticevic. J. Appl. Phys., 82, 270 (1997).
19. V.L. Nguyen, M.T. Nguyen, T.D. Nguyen. Physica B, 292, 153 (2000).
20. R. Charroux, M. Bouhassane, M. Fliyou, A. Nougouai. Physica B, 293, 137 (2000).
21. A. Corella-Madueno, R. Rosas, J.L. Marin, R. Riera. J. Appl. Phys., 90, 2333 (2001).
22. E.M. Kazaryan, L.S. Petrosyan, H.A. Sarkisyan. Intern. Journ. Mod. Phys. B, 15, 4103 (2001).
23. L. Meza-Montes, S.E. Ulloa. Phys. Stat. Sol. (b), 230, 451 (2002).
24. A. Kh. Manaselyan, A.A. Kirakosyan. Phys. E, 22, 825 (2004).
25. Handbook of Mathematical Functions With Formulas, Graphs and Mathematical Tables, edited by M. Abramowitz and I.A. Stegun. U.S. GPO, Washington D.C., 1964.
26. H.X. Jiang. Phys. Rev. B, 35, 9287 (1987).
27. S. Adachi. J. Appl. Phys., 58, R1 (1985).

ԶՐԱԾՆԱՆՄԱՆ ԽԱՌՆՈՒՐԴԻ ԿԱՊԻ ԷՆԵՐԳԻԱՆ ՈՒՌՈՒՑԻԿ ՀԱՏԱԿՈՎ
ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԿԵՏՈՒՄ ՄԱԳՆԵՏԱԿԱՆ ԴԱՇՏՈՒՄ

Ա.Խ. ՄԱՆԱՍԵԼՅԱՆ, Ա.Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ

Արդյունաբար զանգվածի մոտավորությամբ և վարիացիոն մեթոդով հաշվարկված են էլեկտրոնային և խառնուրդային վիճակները ուռուցիկ հատակով քվանտային կետում մագնիսական դաշտում: Հաշվարկները կատարված են քվանտային կետի կենտրոնում գտնվող խառնուրդի համար: Ստացված են խառնուրդի կապի էներգիայի կախվածությունները քվանտային կետի շառավղից, փոսի հատակի ուռուցիկության չափից և մագնիսական դաշտի ինդուկցիայից $Ga_{1-x}Al_xAs/Ga_{1-y}Al_yAs$ համակարգի համար:

BINDING ENERGY OF HYDROGEN-LIKE IMPURITY IN A QUANTUM DOT
WITH CONVEX BOTTOM IN A MAGNETIC FIELD

A.KH. MANASELYAN, A.A. KIRAKOSYAN

Within the framework of effective mass approximation and variational method, electronic and impurity states in a spherical quantum dot with convex bottom in a magnetic field are calculated. Calculations are carried out for the on-center impurity. Dependences of the impurity binding energy on the quantum dot radius, measure of convexity of the bottom of a quantum dot and magnetic field induction are obtained for the $Ga_{1-x}Al_xAs/Ga_{1-y}Al_yAs$ system.