

ОДНОВАЛЕНТНЫЕ И ДВУХВАЛЕНТНЫЕ ПРИМЕСНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ НАНОПЛАСТИНКЕ

В.А. АРУТЮНЯН, А.А. САРКИСЯН*

Российско–Армянский университет, Ереван, Армения

*e-mail: shayk@ysu.am

(Поступила в редакцию 12 апреля 2021 г.)

В рамках вариационного метода исследованы водородоподобные примесные состояния в полупроводниковой нанопластинке, имеющей форму прямоугольного параллелепипеда малой толщины. Показано, что вследствие малой толщины наноструктуры примесь можно рассматривать двумерной. В случае двухвалентной примеси электрон-электронное взаимодействие также рассматривается двумерным и учитывается как возмущение. По аналогии с теорией атома гелия определена энергия электрон-электронного взаимодействия для парасостояния.

1. Введение

Полупроводниковые нанопластинки являются сравнительно недавно реализованными наноструктурами, занимающими промежуточное положение между квантовыми точками и квантовыми ямами [1–5]. Геометрия этих систем соответствует прямоугольному параллелепипеду, одна из сторон которого значительно меньше двух других (рис.1). Одноэлектронный спектр таких систем обладает ярко выраженным подзонным характером, так как размерное квантование в направлении Oz значительно сильнее чем в плоскости xOy , и соответствующие уровни находятся на существенно большем расстоянии друг от друга, по сравнению с теми, которые реализуются в плоскости нанопластинки. Это позволяет рассматривать движение в xOy чисто двумерным, в привязке к одному из

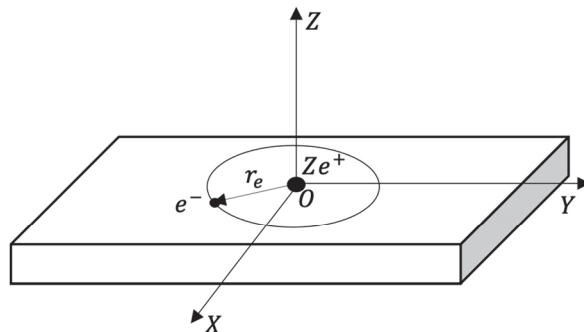


Рис.1. Одновалентная примесь в полупроводниковой нанопластинке.

уровней z -квантования [6]. Ясно, что подобный характер энергетического спектра позволяет осуществлять гибкую манипуляцию энергетических уровней носителей заряда, что может найти непосредственное приложение в технологиях. В частности, полупроводниковые нанопластины уже рассматриваются как перспективные кандидаты на роль элементной базы полупроводниковых приборов нового поколения. Так в работе [7] изучались фотолюминесцентные характеристики коллоидальных CdSe/CdS нанопластинок и возможность их применения в качестве активной среды светодиодов на основе этих структур. Авторы [8] сообщали о реализации гибридных светодиодов на базе коллоидальных CdS нанопластинок и органических материалов. При этом, особо отмечалась необходимость всестороннего исследования нанопластинок CdSe для изготовления указанных светодиодов, обладающих низким напряжением и спектрально чистым цветом, что исключительно важно с точки зрения их непосредственного применения.

Для широкого технологического использования нанопластинок в оптоэлектронных приборах необходимо знать характер как одночастичного, так и многочастичного спектров локализованных в них носителей заряда. В работе [9] была рассмотрена простейшая модель нанопластины с непроницаемыми стенками. Автор изучал электронные и экситонные состояния с учетом квазидвумерности нанопластины, а также учитывал поляризационные эффекты при построении кулоновского потенциала взаимодействия между электроном и дыркой.

Наряду с экситонными комплексами в нанопластинках могут реализоваться примесные системы как одновалентные, так и двухвалентные. При этом примесные комплексы в нульмерных структурах изучали во многих работах [см. 11–16], в которых, в частности, было получено, что энергетические уровни примеси можно манипулировать, изменяя геометрические размеры квантовой точки. Ясно, что исследование примесных состояний в нанопластинках может дать полезную информацию о характере несколько-частичных уровней в нанопластинках, что в свою очередь, позволит использовать полученные результаты при описании трионных и биэкситонных комплексов.

Целью данной работы является теоретическое исследование одновалентных и двухвалентных примесных состояний в нанопластинке CdSe имеющей форму прямоугольного параллелепипеда малой толщины.

2. Теория

2.1. Одновалентное примесное состояние

Рассмотрим задачу одновалентной примеси локализованной в геометрическом центре нанопластины из CdSe. Сразу отметим, что вдоль оси Oz размерное квантование настолько велико ($\{L_x, L_y\} \gg L_z$), что в данном направлении мы не будем учитывать кулоновское взаимодействие между электроном и примесным центром и предположим, что оно двумерно (см. рис.1):

$$V_c = -\frac{Ze^2}{\varepsilon\sqrt{x^2 + y^2}}, \quad (1)$$

где ε – диэлектрическая постоянная CdSe ($\varepsilon = 9.4$), Z – валентность примеси, e – заряд электрона.

В указанном приближении уравнение Шредингера имеет вид:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\parallel}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu_{\perp}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} \Psi + V_{conf}(x, y, z) \Psi - \frac{Ze^2}{\varepsilon\sqrt{x^2 + y^2}} \Psi = E \Psi, \quad (2)$$

$\Psi(x, y, z)$ – волновая функция электрона, а также учтено, что тензор обратной эффективной массы имеет вид

$$\mu_{ij}^{-1} = \begin{pmatrix} \mu_{\parallel}^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & \mu_{\parallel}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & \mu_{\perp}^{-1} \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Ограничивающий потенциал нанопластины аппроксимируем прямоугольными бесконечно высокими стенками:

$$V_{conf}(x, y, z) = V_{conf}^{(1)}(x, y) + V_{conf}^{(2)}(z) = \begin{cases} 0, & \{x, y, z\} \in G \\ \infty, & \{x, y, z\} \notin G \end{cases}, \quad (4)$$

где G область

$$\left. \begin{aligned} -L_x/2 \leq x \leq L_x/2 \\ -L_y/2 \leq y \leq L_y/2 \\ -L_z/2 \leq z \leq L_z/2 \end{aligned} \right\}. \quad (5)$$

Решение уравнение (3) с ограничивающим потенциалом (5) будем искать на основе вариационного метода. Вариационную волновую функцию для основного состояния ($n_x = 1, n_y = 1, n_z = 1$) представим в виде следующего произведения:

$$\Psi_0(x, y, z; \lambda) = f_0(x, y; \lambda) \sqrt{\frac{2}{L_z}} \cos\left(\frac{\pi}{L_z} z\right), \quad (6)$$

где

$$f_0(x, y; \lambda) = N(\lambda) \cos\left(\frac{\pi}{L_x} x\right) \cos\left(\frac{\pi}{L_y} y\right) e^{-\lambda\sqrt{x^2 + y^2}}, \quad (7)$$

λ – вариационный параметр, $N(\lambda)$ – нормировочная постоянная вариационной волновой функции $f_0(x, y; \lambda)$ описывающей основное состояние в плоскости xOy и удовлетворяющей уравнению:

$$\begin{aligned} \hat{H}^{2D} f_0(x, y; \lambda) = & -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\parallel}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) f_0(x, y; \lambda) - \frac{Ze^2 f_0(x, y; \lambda)}{\varepsilon\sqrt{x^2 + y^2}} \\ & + V_{conf}^1(x, y) f_0(x, y; \lambda) = E_0^{2D} f_0(x, y; \lambda) \left(E_0^{2D} = E - \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu_{\perp} L_z^2} \right). \end{aligned} \quad (8)$$

По стандартной процедуре, из условия нормировки, находим нормировочную постоянную $N(\lambda)$:

$$N(\lambda) = \left\{ \int_{-L_x/2}^{L_x/2} \int_{-L_y/2}^{L_y/2} \cos^2\left(\frac{\pi}{L_x}x\right) \cos^2\left(\frac{\pi}{L_y}y\right) e^{-2\lambda\sqrt{x^2+y^2}} dx dy \right\}^{-1/2}. \quad (9)$$

Подставив вариационную волновую функцию (8) в выражение для среднего значения энергии $\langle E_0^{2D}(\lambda) \rangle$:

$$\langle E_0^{2D}(\lambda) \rangle = \int_{-L_x/2}^{L_x/2} \int_{-L_y/2}^{L_y/2} f_0(x, y) \hat{H}^{2D} f_0(x, y) dx dy, \quad (10)$$

придем к условию минимизации:

$$\frac{d\langle E_0^{2D}(\lambda) \rangle}{d\lambda} = 0. \quad (11)$$

Из (12) можно определить зависимость $\lambda_{\min}$ от геометрических параметров нанопластинки $L_x = L_y = L$, а, следовательно, и зависимость энергии основного состояния примеси, от этих параметров. Отметим, что в дальнейших расчетах для нанопластинки из CdSe длина измеряется в эффективных боровских радиусах $a_B^* = \hbar^2 \epsilon / (\mu_{\parallel} e^2) = 4.25$ нм, а энергия в эффективных энергиях Ридберга $E_R = \hbar^2 / (2\mu_{\parallel} a_B^{*2}) = \mu_{\parallel} e^4 / (2\hbar^2 \epsilon^2) = 18.01$ мэВ ($\mu_{\parallel} = 0.12m_e$).

На рис.2. представлена зависимость вариационного параметра λ от размеров двумерной ямы. С увеличением L величина λ растет, приближаясь к безразмерному значению 2, что соответствует точному результату для двумерного атома водорода [10].

На рис.3. представлена зависимость энергии основного состояния одновалентной примеси от L . Из рисунка следует, что при малых значениях L энергия примеси положительна. Это является следствием влияния сильного

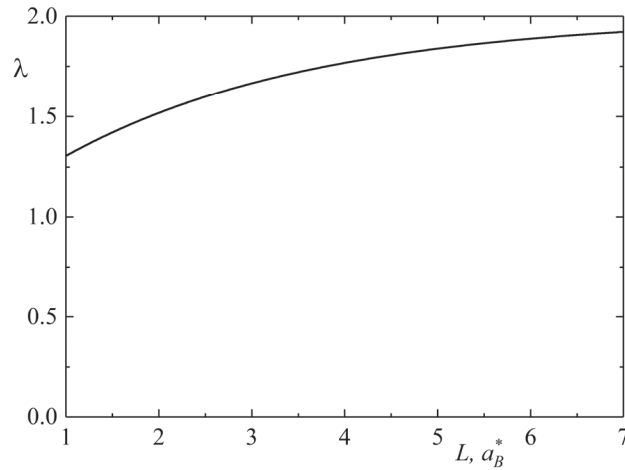


Рис.2. Зависимость вариационного параметра λ от L .

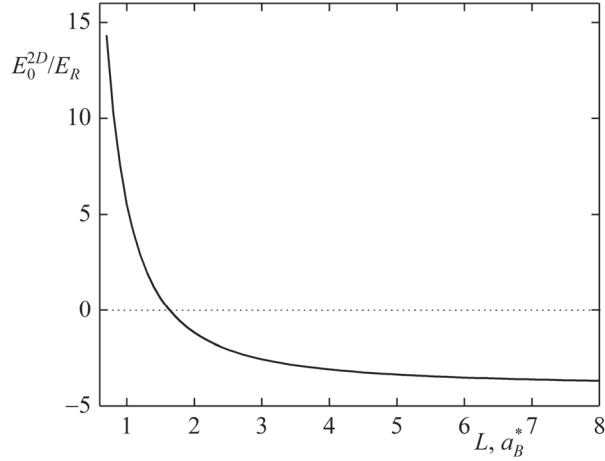


Рис.3. Энергия основного состояния одновалентной примеси в зависимости от L .

размерного квантования, которое доминирует над кулоновским, и суммарная энергия системы принимает положительное значение. С ростом L влияние стенок постепенно ослабевает, и энергия начинает уменьшаться. При значении $L \approx 1,7a_B^*$ полная энергия системы становится равной нулю. При дальнейшем увеличении размеров нанопластины уровень энергии основного состояния будет стремиться к известному значению [10]

$$E_0^{2D} = -4E_R. \quad (12)$$

2.2. Двухвалентное примесное состояние

Гамильтониан двухвалентной примеси имеет вид:

$$\begin{aligned} \hat{H}(1,2) = & -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\parallel}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu_{\parallel}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} \right) + V_{conf}(x_1, y_1) + V_{conf}(x_2, y_2) \\ & - \frac{Ze^2}{\epsilon\sqrt{x_1^2 + y_1^2}} - \frac{Ze^2}{\epsilon\sqrt{x_2^2 + y_2^2}} + \frac{e^2}{\epsilon\sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}}, \end{aligned} \quad (13)$$

где последний член описывает электрон-электронное взаимодействие, которое будем считать возмущением. Задачу решаем по аналогии с теорией атома гелия. Для этого заметим, что невозмущенный гамильтониан можно представить в виде суммы

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_1^{2D} + \hat{H}_2^{2D}, \quad (14)$$

где

$$\hat{H}_1^{2D} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\parallel}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} \right) + V_{conf}(x_1, y_1) - \frac{Ze^2}{\epsilon\sqrt{x_1^2 + y_1^2}}, \quad (15)$$

$$\hat{H}_2^{2D} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\parallel}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} \right) + V_{conf}(x_2, y_2) - \frac{Ze^2}{\varepsilon \sqrt{x_2^2 + y_2^2}}. \quad (16)$$

Воспользовавшись результатами предыдущего пункта, поправку электрон-электронного взаимодействия к основному состоянию определим в рамках теории возмущений. Для этого заметим, что двухэлектронная волновая функция запишется как произведение

$$\Phi_0^{2D}(1, 2) = f_0(x_1, y_1; \lambda) f_0(x_2, y_2; \lambda), \quad (17)$$

где $f_0(x, y; \lambda)$ определяется согласно (8). Что касается спиновой составляющей двухчастичной волновой функции, то она соответствует синглетному терму (парасостояние) и имеет стандартный вид в z -представлении по σ -матрицам Паули:

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (18)$$

$$\chi_A(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1) \},$$

где $\alpha = (1 \ 0)^T$, $\beta = (0 \ 1)^T$.

Таким образом для определения кулоновской поправки электрон-электронного взаимодействия получаем:

$$\delta E = \int_{-L_x/2}^{L_x/2} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} \int_{-L_y/2}^{L_y/2} \int_{-L_y/2}^{L_y/2} \Phi_0^{2D*}(1, 2) \frac{e^2}{\varepsilon \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}} \Phi_0^{2D}(1, 2) dx_1 dx_2 dy_1 dy_2. \quad (19)$$

На рис.4. Представлена зависимость δE от геометрических размеров нанопластинки. Как следует из приведенного графика с увеличением размеров нанопластинки кулоновская поправка электрон-электронного взаимодействия уменьшается. Это естественно, так как взаимное отталкивание электронов отдаляет их друг от друга. При больших значениях L влияние стенок становится не существенным и δE будет стремиться к постоянному значению E_R .

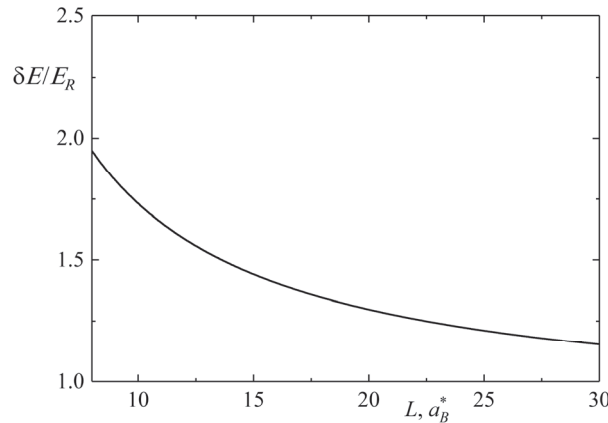


Рис.4. Зависимость кулоновской энергии электрон-электронного взаимодействия двухвалентной примеси в полупроводниковой нанопластинке.

3. Заключение

Таким образом, в полупроводниковых нанопластинках могут реализоваться одновалентные примесные состояния имеющие двумерный характер. При этом энергия примеси может принимать как положительные значения обусловленные влиянием сильного размерного квантования стенок нанопластинки, так и отрицательные. С ростом геометрических размеров нанопластинки данная энергия стремится к известному точному значению основной энергии двумерной примеси $-4E_R$.

В случае двухвалентной примеси электрон-электронное взаимодействие, при сравнительно больших размерах нанопластинки, можно рассматривать как поправку и вычислять в рамках теории возмущений. Расчеты показывают, что с ростом размеров нанопластинки энергия электрон-электронного взаимодействия уменьшается приближаясь к значению E_R .

Авторы выражают глубокую благодарность к.ф.м.н., Д. Багдасаряну за полезные дискуссии. Данная работа выполнена в рамках программы № 10-2/1-5 базового финансирования со стороны КН РА.

ЛИТЕРАТУРА

1. A.O. Bochkarev, M.A. Grekov. Physical Mesomechanics, **22**, 209 (2019).
2. B. Karami, S. Karami. Advances in nano research, **7**, 51 (2019).
3. E.V. Shornikova et al. Nano letters, **20**, 1370 (2020).
4. B. Jin, H. Wang, M.L. Sushko, C. Jin, R. Tang. Nanoscale, **12**, 19592 (2020).
5. D. Xiang, Y. Li, L. Wang, Y. Zhao, K. Wu. ACS Photonics, **8**, 745 (2021).
6. D.A. Baghdasaryan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan, K.D. Moiseev. Physica E. **90**, 170 (2017).
7. Y. Yanget al. IEEE Transactions on Nanotechnology, **18**, 220 (2019).
8. A.G. Vitukhnovsky et al. Chem. Phys. Letters, **619**, 185 (2015).
9. J. Planelles. Theor. Chem. Acc., **136**, 81 (2017).
10. Л.Г. Мардоян, Г.С. Погосян, А.Н. Сисакян, В.М. Тер-Антонян. Теоретическая и математическая физика, **66**, 99 (1984).
11. Д.Б. Айрапетян, Э.М. Казарян, О.Х. Тевосян. Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 190 (2014).
12. О.Х. Тевосян. Изв. НАН Армении, Физика, **47**, 427 (2012).
13. Р.Г. Погосян. Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 114 (2014).
14. A.K. Manaselyan, A.V. Ghazaryan, A.A. Kirakosyan. J. Contemp. Phys., **43**, 211 (2008).
15. A.K. Manaselyan, A.V. Ghazaryan, A.A. Kirakosyan. J. Contemp. Phys., **45**, 269 (2010).
16. T.A. Sargsian. J. Contemp. Phys., **54**, 168 (2019).

ՄԻԱՐԺԵՔ ԵՎ ԵՐԿԱՐԺԵՔ ԽԱՌՆՈՒՐԴԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ
ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ ՆԱՆՈԹԻԹԵՂՈՒՄ

Վ.Ա. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Հ.Ա. ՍԱՐԳՍՅԱՆ

Վարիացիոն մեթոդի շրջանակներում ուսումնասիրվում են ջրածնանման խառնուրդի վիճակները կիսահաղորդչային նանոթիթեղում, որն ունի ուղղանկյուն զուգահեռանիստի տեսք: Ցույց է տրված, որ նանոկառուցվածքի փոքր հաստության շնորհիվ խառնուրդը կարելի է դիտարկել երկչափ: Երկարժեքի խառնուրդի դեպքում էլեկտրոն-էլեկտրոն փոխազդեցությունը նույնպես դիտարկվում է երկչափ, և խնդիրը լուծվում է խոտորումների տեսության հիման վրա: Հելիումի ատոմի տեսության համանմանությամբ որոշված է էլեկտրոն-էլեկտրոնային փոխազդեցության պարավիճակի էներգիան:

MONOVALENT AND DIAVALENT IMPURITY STATES
IN A SEMICONDUCTOR NANOPATELETS

V.A. HARUTYUNYAN, H.A. SARKISYAN

Within the framework of the variational method, hydrogen-like impurity states in the semiconductor nanoplatelets with the shape of a rectangular parallelepiped of a small thickness are investigated. Due to the small thickness of the nanostructure, it is shown that, the impurity can be considered two-dimensional. In the case of a divalent impurity, the electron-electron interaction is also considered two-dimensional and taken into account as a perturbation. By the analogy with the theory of the helium atom, the electron-electron interaction energy is determined for the para-state.