

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ
КВАНТОВОЙ ТОЧКИ С ОГРАНИЧИВАЮЩИМ
ТРЕХМЕРНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ ГИПЕРБОЛИЧЕСКОЙ ФОРМЫ

Ալ.Գ. Ալեքսանյան, Դ.Ր. Ժամալյան, Լ.Ր. Մինասյան, Դ.Տ. Նիկոգոսյան

В работе вычисляется спектр и волновые функции квазичастиц в полупроводниковой квантовой точке в случае, когда ограничивающий потенциал аппроксимируется трехмерной гиперболической ямой. Выбор формы потенциальной ямы связан с тем, что в зависимости от различия постоянных решеток подложки и гетерослоя, характер переходной области между ними и ограничивающий потенциал КТ варьирует в определенных пределах.

1. Важными объектами исследования фундаментальной и прикладной физики твердого тела являются квазиуменьшенные гетероструктуры (массивы квантовых точек), в которых наблюдаются уникальные оптические и кинетические свойства, не характерные для массивных образцов. Процесс самоорганизованного формирования полупроводниковых квантовых точек (КТ) при молекулярно-пучковом росте напряженных гетеросистем осуществляется в полях упругих напряжений, возникающие за счет различия постоянных решеток подложки и гетерослоя. Технологии, использующие эффект спонтанной трансформации тонкого двумерного напряженного слоя, осажденного на поверхность материала с отличающейся постоянной решетки с образованием трехмерных наноструктур (КТ) за счет упругой релаксации деформации и условия эпитаксиального роста, определяют параметры КТ и характер их пространственного упорядочения [1], [2].

Для теоретического описания одноэлектронных состояний в КТ часто используется модель "жестких стенок" (сферически-симметричная потенциальная яма с бесконечно-высокими стенками).

Более строгий подход к форме удерживающего потенциала, основанное на самосогласованном решении уравнений Пуассона и Шредингера, показывает, что потенциал конфайнмента достаточно близок параболической [3], [4].

Опираясь на такой вполне реалистической модели, удалось объяснить ряд экспериментов [5], получить аналитические выражения для магнитооптических характеристик комплексов КТ-«примесный центр», синтезированных в прозрачной диэлектрической матрице [4], и т.д.

Но часто, при исследовании поведения электронов в КТ, с необходимостью учета их отражения или просачивания в окружающую среду, возникает потребность видоизменения хода ограничивающего потенциала КТ, что влияет на энергетический спектр носителей заряда [6]. Так что целесообразно исследование электронных состояний в микрокристалле, с учетом влияния его границ на эти состояния. Несомненный интерес представляет исследование спектров квазичастиц в полупроводниковой КТ, когда ограничивающий потенциал аппроксимируется трехмерной гиперболической ямой достаточно общего вида

$$U(r) = -\frac{U_0}{\cosh^2 \alpha r}, \quad (1)$$

где U_0 - амплитуда потенциала КТ, являющаяся эмпирическим параметром, α - варьируемый подгоночный параметр, для оценивания которого можно воспользоваться соотношением неопределенностей. В данном случае оно имеет вид

$$P \cdot r_0 \sim \hbar,$$

где r_0 - радиус КТ, P - импульс носителя заряда. Исключив из очевидного соотношения

$$\frac{P^2}{m_{\text{э.в}}^*} - \frac{U_0}{ch^2 \alpha r_0} \sim 0,$$

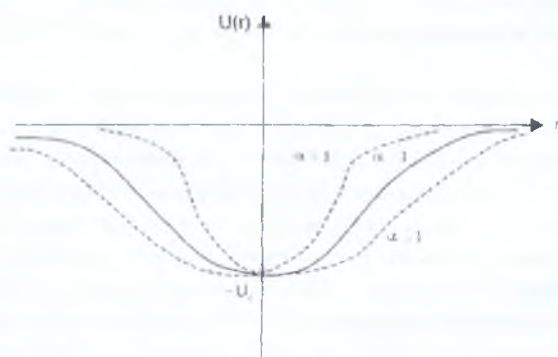
окончательно можно оценивать α

$$\frac{\hbar^2}{m_{\text{э.в}}^* \cdot r_0^2} \sim \frac{U_0}{ch^2 \alpha r_0}$$

В частности, при параметрах $r_0 \sim 100 \text{ \AA}$, $U_0 = 0.2 \text{ эВ}$, $m^* = 0.067 m_0$,

$$\alpha \sim 2 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$$

Обоснованность подобного выбора потенциального профиля объясняется тем, что в зависимости от различия постоянных решеток подложки и гетерослоя, характер переходной области между ними и ограничивающий потенциал КТ варьируется в определенных пределах.



В предлагаемой работе, в приближении эффективной массы, теоретически исследуются электронные состояния в КТ с ограничивающим потенциалом (1), в случае параболического закона дисперсии носителей заряда.

Таким образом считается выполняющейся такое физическое условие, когда геометрические размеры КТ важного превышают постоянной решетки кристалла КТ, т.е. полагается известным эффективную массу электрона (дырки) в КТ и равным ее значению в массивном образце.

Дальнейшие рассуждения, эквивалентные для электрона и дырки, проводятся на примере электрона.

2. Волновое уравнение Шредингера в однократно заполненной (электроном или дыркой) КТ имеет следующий стандартный вид,

$$-\frac{\hbar^2}{2m_c^*} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + U(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (2)$$

Здесь m_c^* - эффективная масса носителя заряда, E - энергия ионизации в КТ, $U(\vec{r})$ - ограничивающий потенциал (1), создаваемый гетероструктурой. В матрице, окружающей КТ, $U(\vec{r})$ принимается равным нулю.

В сферической системе координат уравнение (2) преобразуется к виду

$$\frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi(r)}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \cdot \frac{\partial \psi(r)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2 \psi(r)}{\partial \varphi^2} \right] + \frac{2m_c^*}{\hbar^2} (E - U(\vec{r})) \psi(\vec{r}) = 0 \quad (3)$$

В сферически симметричной яме с профилем (1) решения уравнения (3) ищем в виде

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad (4)$$

где $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ -нормированные шаровые функции, p_r -радиальное, l -орбитальное, m -магнитное квантовые числа

Радиальная волновая функция удовлетворяет уравнению:

$$\frac{d^2 R_{n,l}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{n,l}}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{n,l} + \frac{2m_e^*}{\hbar^2} \left(E + \frac{U_0}{ch^2 \alpha r} \right) R_{n,l} = 0 \quad (5)$$

Очевидно, что уровни энергии носителя заряда вырождены по магнитному квантовому числу m с кратностью вырождения $(2l+1)$ при данном l .

Преобразуем радиальное уравнение, вводя новую функцию

$$R_{n,l}(r) = \frac{\chi_{n,l}(r)}{r}, \quad (6)$$

которая удовлетворяет "одномерному" уравнению

$$\frac{d^2 \chi_{n,l}(r)}{dr^2} + \frac{2m_e^*}{\hbar^2} \left(E + \frac{U_0}{ch^2 \alpha r} - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \cdot \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \chi_{n,l}(r) = 0 \quad (7)$$

Условие конечности $R_{n,l}(r)$ при $r=0$ приводит к краевому условию для функции $\chi_{n,l}(r)$:

$$\chi_{n,l}(r=0) = 0,$$

которая вместе с тем должна оставаться конечной и при $r \rightarrow \infty$.

3. В частном случае s -состояния с $l=m=0$

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} + \frac{2m_e^*}{\hbar^2} \left(E + \frac{U_0}{ch^2 \alpha r} \right) \chi = 0 \quad (8)$$

Проведем замену переменной [7]

$$y = th \alpha r, \quad (9)$$

где, при $0 < r < \infty$, $0 < y < 1$ и вводя обозначения

$$\mu = \sqrt{-\frac{2m_e^* E}{\hbar^2 \alpha^2}}, \quad \frac{2m_e^* U_0}{\alpha^2 \hbar^2} = \nu(\nu+1), \quad (10)$$

приходим к уравнению обобщенных функции Лежандра

$$(1-y^2) \frac{d^2 \chi}{dy^2} - 2y \frac{d\chi}{dy} + \left[\nu(\nu+1) - \frac{\mu^2}{1-y^2} \right] \chi = 0, \quad (11)$$

которое имеет следующие фундаментальные системы решений при $0 \leq y < 1$ [8]:

1) если $\nu \pm \mu \neq 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, то линейно независимыми решениями (11) являются функции

$$P_\nu^\mu(y) = \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \left(\frac{1+y}{1-y} \right)^{\mu/2} F_2 \left(-\nu, \nu+1; 1-\mu, \frac{1-y}{2} \right),$$

$$Q_\nu^\mu(y) = \frac{\pi}{2 \sin \mu \pi} \left[P_\nu^\mu(y) \cos \mu \pi - \frac{\Gamma(\nu+\mu+1)}{\Gamma(\nu-\mu+1)} P_\nu^{-\mu}(y) \right],$$

которые, однако не удовлетворяют условию конечности при $y \rightarrow 1 (r \rightarrow \infty)$;

2) если $\nu \pm \mu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$; $\mu \neq 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, то линейно независимыми решениями уравнения (11) являются функции (сферические)

$$P_\nu^\mu(y) \text{ и } P_\nu^{-\mu}(y).$$

Условию конечности при $\gamma \rightarrow \infty (y \rightarrow 1)$ удовлетворяет решение

$$P_{\nu}^{\mu}(y) = \frac{1}{\Gamma(1+\mu)} \left(\frac{1-y}{1+y} \right)^{\mu/2} F_2 \left(-\nu; \nu+1; 1+\mu; \frac{1-y}{2} \right) \quad (12)$$

С учетом соотношения [8]

$$P_{\nu}^{\mu}(0) = 2^{-\mu} \pi^{-1/2} \cos[(\mu+\nu)\pi/2] \frac{\Gamma\left(\frac{1+\mu+\nu}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\nu-\mu}{2}+1\right)}, \quad (13)$$

анализируем краевое условие (а) для решения (12), для которого

$$P_{\nu}^{\mu}(0) = 2^{-\mu} \pi^{-1/2} \cos[(\nu-\mu)\pi/2] \frac{\Gamma\left(\frac{1+\nu-\mu}{2}\right)}{\Gamma\left(1+\frac{\nu+\mu}{2}\right)}. \quad (14)$$

Условие (а) выполняется при $\nu-\mu = 2n+1$,

из которого и оцениваются разрешенные значения энергии в яме. Здесь $n = n_r \geq 0$ радиальное квантовое число, определяющее число узлов радиальной части волновой функции $R_{n_r}(\bar{r})$, при конечных r , т.е.

$$n = n_r = 0, 1, 2, \dots,$$

поскольку, с учетом обязательного условия $|E| < U_0$, имеем

$$\nu = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{2m_e^* U_0}{\alpha^2 \hbar^2}} > \sqrt{\frac{2m_e^* |E|}{\alpha^2 \hbar^2}} = \mu.$$

Таким образом энергетический спектр в гиперболической яме состоит из невырожденных уровней (не считая вырождение по магнитному квантовому числу)

$$E_{n_r} = -\frac{\alpha^2 \hbar^2}{8m_e^*} \left[-(4n_r + 3) + \sqrt{1 + \frac{8m_e^* U_0}{\alpha^2 \hbar^2}} \right]^2 \quad (15)$$

Для целочисленных значений $\nu = n$ и $\mu = m$ дифференциальное уравнение (11) (при $|\nu| > |\mu|$) имеет в качестве решений при соединенную функцию Лежандра [9]

$$P_n^m(y) = \frac{(-1)^m (2n-1)!}{(n-m)!} (1-y^2)^{m/2} y^{n-m} F_1 \left(\frac{m-n}{2}; \frac{m-n+1}{2}; \frac{1}{2} - n; \frac{1}{y^2} \right), \quad (16)$$

которая при $n = m+1$ одновременно удовлетворяет условию конечности при $y \rightarrow 1 (\gamma \rightarrow \infty)$ и краевому условию.

Т.е. в гиперболических ямах, параметры которых, в отличие от рассмотренного выше случая целочисленных μ и ν , удовлетворяют условию

$$\left(\frac{2m_e^* U_0}{\alpha^2 \hbar^2} = n(n+1) \right), \quad U_0 = \frac{\alpha^2 \hbar^2}{2m_e^*} \cdot n(n+1), \quad (17)$$

возможны связанные состояния (16) с

$$E_n = -\frac{\alpha^2 \hbar^2}{2m_e^*} (n-1)^2 = -\frac{\alpha^2 \hbar^2}{8m_e^*} \left[-3 + \sqrt{1 + \frac{8m_e^* U_0}{\alpha^2 \hbar^2}} \right]^2, \quad (18)$$

[†] Число уровней (15) в яме с неслучайными ν конечно и определяется условием $\mu > 0$, т. е.

$$\mu = \nu - 2n_r - 1 > 0, \quad n_r < \frac{1}{2}(\nu - 1) = \frac{1}{4} \left(-3 + \sqrt{1 + \frac{8m_e^* U_0}{\alpha^2 \hbar^2}} \right) = n_0 \quad (19)$$

Сравнение с энергетическим спектром дискретных уровней одномерной гиперболической ямы [7], устанавливает следующее соответствие между квантовыми числами в обоих ямах:

$$2n_r^{(\text{трех})} + 1 = n^{(\text{одно})} \quad (20)$$

Из (19) очевидно, что связанные состояния в гиперболической яме могут образовываться лишь при условии $n_0 > 0$, т. е.

$$\frac{1}{4} \left(-3 + \sqrt{1 + \frac{8m_e^* U_0}{\alpha^2 \hbar^2}} \right) \geq 0, \quad U_0 > \frac{\alpha^2 \hbar^2}{m_e^*} \quad (21)$$

(носители заряда могут захватываться в достаточно широкой ($\alpha < 1$) и глубокой (большие U_0) яме).

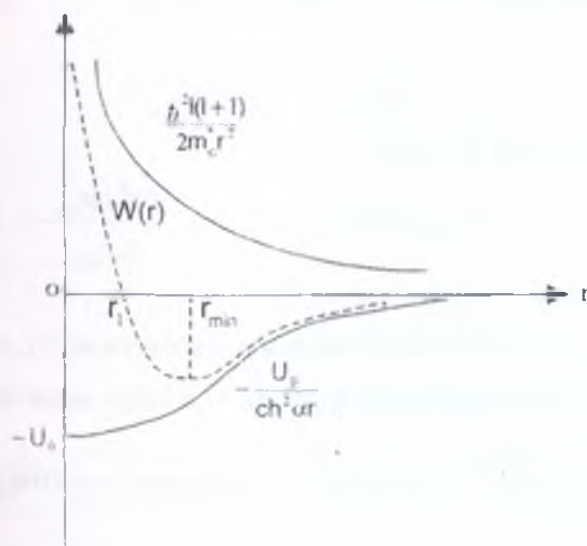
Примечательна тот факт, что в соответствии (18), при $n=1, E_n=0$, т. е. в яме с $U_0 = \frac{\alpha^2 \hbar^2}{2m_e^*} \cdot n(n+1) = \frac{\alpha^2 \hbar^2}{m_e^*}$, связанные состояния отсутствуют, что подтверждает условие (21).

4. При $l \neq 0$ предстоит решение уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{d^2 \chi}{dr^2} + W(r) \chi = E \chi, \quad (22)$$

где

$$W(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e^* r^2} - \frac{U_0}{ch^2 \alpha r} \quad (23)$$



Очевидно, что при больших l частица не может локализоваться в яме $U(r)$, так как при любых r $W(r) > 0$ и $\langle E \rangle > 0$. Т. е. при $l \gg 1$ спектр частицы будет непрерывным (связанные состояния отсутствуют).

Существование связанных состояний в эффективном поле $W(r)$ обеспечивается возможностью формирования обязательного минимума при некотором $r_{\min}$:

$$\left(\frac{dW(r)}{dr} \right)_{r=r_{\min}} = 0, \quad \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{m_e^* r_{\min}^3} = \frac{2U_0 \alpha \cdot \hbar \alpha r_{\min}}{ch^2 \alpha r_{\min}} \right), \quad (24)$$

При этом, если эффективная потенциальная яма недостаточно глубока

$$|W(r_{\min})| = \frac{U_0}{ch^2 \alpha r_{\min}} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e^* r_{\min}^3} \ll \frac{\hbar^2}{m_e^* r_0^2}, \quad (25)$$

где r_0 - ширина ямы, то носители заряда и в этом случае не могут захватиться ямой [7]. В противном случае

$$|W(r_{\min})| \geq \frac{\hbar^2}{m_e^* r_0^2}, \quad (26)$$

в трехмерной гиперболической яме уже могут существовать энергетические уровни связанных состояний $l \leq l_0$, с предельным значением орбитального квантового числа l_0 . Для l_0 из (26) имеем

$$l_0(l_0+1) \sim \frac{2m_e^* r_{\min}^2}{\hbar^2} \cdot \frac{U_0}{ch^2 \alpha r_{\min}} - \frac{2r_{\min}^2}{r_0^2} \quad (27)$$

С учетом (24)

$$l_0(l_0+1) \sim \frac{2r_{\min}^2}{r_0^2} \cdot \left[\frac{ch \alpha r_{\min}}{\alpha r_{\min}} - 1 \right]^{-1} \quad (28)$$

где $\left(\frac{ch \alpha r_{\min}}{\alpha r_{\min}} \right)$ - имеет ограниченное значение, превышающее 1. В этом можно убедиться исходя из условия минимума (24)

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e^* r_{\min}^3} = \frac{U_0}{ch^2 \alpha r_{\min}} (\alpha r_{\min} \cdot \hbar \alpha r_{\min}),$$

и очевидного неравенства, имеющее место в точке минимума

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e^* r_{\min}^3} < \frac{U_0}{ch^2 \alpha r_{\min}},$$

сопоставление которых приводит к условию

$$\alpha r_{\min} \cdot \hbar \alpha r_{\min} < 1, \text{ т. е. } \frac{ch \alpha r_{\min}}{\alpha r_{\min}} > 1.$$

Искомую функцию χ , являющаяся решением уравнения (22), представим в виде разложения по решениям (12) уравнения (8), удовлетворяющие условию конечности при $r \rightarrow \infty$ и краевому условию (а).

При нецелочисленных μ и ν , являемые соотношениями (10) и (15),

$$\chi = \sum_{n=0}^{n_0} a_n \cdot P_n^\mu(\hbar \alpha r) \quad (29)$$

Здесь $P_v^{\mu}(th\alpha r)$ - решение уравнения (8), даваемое выражением (12).

После подстановки (29) исходное уравнение (22) приводится к виду

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n \cdot \left\{ \left[P_v^{\mu}(th\alpha r) \right]' + \frac{2m_c^*}{\hbar^2} \left(E_n + \frac{U_0}{ch^2 \alpha r} \right) P_v^{\mu}(th\alpha r) \right\} = \sum_{n=0}^{n_0} a_n \left(\frac{2m_c^*}{\hbar^2} (E_n - E) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) P_v^{\mu}(th\alpha r) \quad (30)$$

где E_n имеет вид (15).

Умножим обе части последнего уравнения с левой стороны на $P_v^{-\mu}(th\alpha r)$ и интегрируем по r . С учетом (8) приходим к следующей системе $(1+n_0)$ линейных однородных уравнений относительно неизвестных коэффициентов a_n ;

$$\sum_{n=0}^{n_0} \left(\frac{2m_c^*}{\hbar^2} (E_n - E) \cdot S_{n,n} + l(l+1) \cdot U_{n,n} \right) a_n = 0, \quad (31)$$

$$n_r = 0, 1, 2, \dots, n_0;$$

$$S_{n',n} = \int_0^{\infty} P_v^{-\mu}(th\alpha r) \cdot P_v^{\mu}(th\alpha r) dr,$$

$$U_{n',n} = \int_0^{\infty} P_v^{-\mu}(th\alpha r) \cdot \frac{1}{r^2} P_v^{\mu}(th\alpha r) dr.$$

Условие разрешимости системы (31) приводит к секулярному уравнению [10]

$$\left\| \frac{2m_c^*}{\hbar^2} (E_{n_r} - E) \cdot S_{n_r, n_r} + l(l+1) U_{n_r, n_r} \right\| = 0. \quad (32)$$

Раскрывая определитель

$$n_r = 0 \quad n_r = 1 \quad \dots \quad n_r = n_0 \quad = 0,$$

$$\begin{vmatrix} n_r = 0 & \left[\frac{2m_c^*}{\hbar^2} (E_{n_0} - E) S_{n_0, n_0} + l(l+1) \cdot U_{n_0, n_0} \right] & & & \\ n_r = 1 & \dots & \dots & \dots & \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & \\ n_r = n_0 & \dots & \dots & \dots & \left[\frac{2m_c^*}{\hbar^2} (E_{n_0} - E) S_{n_0, n_0} + l(l+1) \cdot U_{n_0, n_0} \right] \end{vmatrix}$$

получим уравнение степени n_0 относительно неизвестного значения энергии E . Оно имеет n_0 действительных корней, которые сопоставимы с уровнями энергии в гиперболической яме при $l \neq 0$. Коэффициенты a_n определяются из системы уравнений (31), при подстановке значений E . В частности, при $l=0$, с учетом ортогональности собственных функций $P_v^{-\mu}(th\alpha r)$, соответствующие дискретному спектру (15), раскрытие упрощенного определителя.

