

УДК 621.315.592

Академик Э. М. Казарян<sup>а,б</sup>, Л. С. Петросян<sup>а,б</sup>, А. А. Саркисян<sup>а</sup>

### Примесные состояния в усеченной параболической квантовой точке

(Представлено 9/VIII 2003)

1. Квантовые точки (КТ) продолжают оставаться одним из наиболее интенсивно исследуемых классов низкоразмерных систем [1]. Уникальность этих структур заключается в том, что энергетические уровни носителей заряда (НЗ), находящихся в них, будучи полностью квантованными во многом обладают свойствами уровней реальных атомов. Не случайно поэтому, что такие системы называют "искусственными атомами". При этом в отличие от реальных атомов в КТ профиль ограничивающего потенциала может быть оптимизирован под конкретную техническую задачу [2].

С теоретической точки зрения вид ограничивающего потенциала определяет спектр и волновые функции НЗ в КТ. А они в свою очередь будут формировать оптические, кинетические и т.п. характеристики КТ [3]. В последние годы одной из наиболее часто употребляемых моделей ограничивающего потенциала КТ является трехмерная параболическая яма [4]. Такая модель вполне естественна, так как можно ожидать, что в процессе роста КТ имеет место некоторое перемешивание компонентов КТ и окружающей среды. Это приводит к сглаживанию профиля потенциала ямы. Ясно, что в первом приближении такой потенциал можно аппроксимировать параболическим. Ряд экспериментов, и в частности обнаружение обобщения теоремы Кона на случай КТ [4,5], подтвердили правомерность такой аппроксимации. С другой стороны ясно, что параболическое приближение реализуемо для нижних энергетических уровней НЗ. Правильнее более реалистичной считать модель усеченной параболической ямы, считая при этом, что усечение происходит в точке, где энергия достигает края зоны проводимости в окружающей среде [2, 6, 7]. В связи с этим вполне естественно желание изучить физические процессы в КТ с вышеуказанным ограничивающим потенциалом. В частности интересно выяснить влияние такой модификации параболического потенциала на водородоподобные примесные уровни.

2. Предположим, что примесь находится в центре сферической КТ GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As, ограничивающий потенциал которой имеет вид

$$U(r) = \begin{cases} U_1(r) = \frac{\mu_1 \omega^2 r^2}{2}, & r < r_0 \\ U_2(r) = U_0, & r \geq r_0, \end{cases} \quad (1)$$

где  $r_0$  - радиус КТ,  $\omega = [1/(r_0)] \sqrt{((2U_0)/(\mu_1))}$  - частота ограничивающего потенциала КТ,  $\mu_1 = 0.067m_e$  - эффективная масса электрона в полупроводнике GaAs ( $m_e$  - масса свободного электрона),  $U_0$  - высота ограничивающего потенциала (для GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As  $U_0 = 1.247 \cdot 0.6 \cdot x$

(эВ), где  $x$  - концентрация Al). Уравнение Шредингера для потенциала (1) будет иметь следующий вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \Delta \Psi_1 + \frac{\mu_1 \omega^2 r^2}{2} \Psi_1 - \frac{\alpha}{r} \Psi_1 = E \Psi_1, \quad r < r_0, \quad (2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_2} \Delta \Psi_2 + U_0 \Psi_2 - \frac{\alpha}{r} \Psi_2 = E \Psi_2, \quad r \geq r_0, \quad (3)$$

где  $\mu_2 = (0.067 + 0.083x)m_e$  - эффективная масса электрона в среде из  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ ,  $\alpha = [(e^2)/(\epsilon)]$ ,  $e$  - заряд электрона,  $\Psi_1$  - волновая функция электрона в КТ,  $\Psi_2$  - волновая функция электрона в окружающей среде,  $\epsilon \equiv \epsilon_1 = \epsilon_2$  - диэлектрическая проницаемость КТ и окружающей среды (для GaAs  $\epsilon = 13.18$ ). При этом мы пренебрегли разницей между  $\epsilon_1$  и  $\epsilon_2$ , так как обусловленный этой разницей эффект мал. Как видно из гамильтониана, электрон находится в сферической яме с эффективной потенциальной энергией  $U_{\text{eff}}(r) = U(r) - \alpha/r$  (см. рис. 1). Так как данная задача не является точно решаемой, мы будем рассматривать ее в рамках вариационного метода. Для этого на первой стадии обсудим задачу о поведении электрона внутри ямы с потенциалом (1) в отсутствие примесного центра. Тогда задача о нахождении волновых функций в двух областях  $r \geq r_0$  и  $r < r_0$  становится точно решаемой, и соответствующие решения будут иметь вид

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \begin{cases} \Psi_1(r, \theta, \varphi) = C_1 e^{-(a_1 r^2)/2} r^l {}_1F_1 \left[ \begin{matrix} n_1, l + \frac{3}{2} \\ 2 \end{matrix}; a_1 r^2 \right] Y_{lm}(\theta, \varphi), & r < r_0 \\ \Psi_2(r, \theta, \varphi) = C_1 A_1 h_1^{(+)}(ik_1 r) Y_{lm}(\theta, \varphi), & r \geq r_0, \end{cases} \quad (4)$$

где  $a_1 = [(\mu_1 \omega)/(\hbar)]$ ,  $n_1 = -[1/2][(E/(\hbar \omega)) - 1 - [3/2]]$ ,  $k_1 = \sqrt{[(2\mu_2(U_0 - E))/(\hbar^2)]}$ ,  $C_1^2 = [1/(I_{11} +$

$A_1^2 I_{21})]$ ,  $A_1 = [(e^{-(a_1 r^2)/2} r^l {}_1F_1[n_1, l + [3/2]; a_1 r^2])/(h_1^{+}(ik_1 r))]$ ,  $I_{11} = \int_0^{r_0} e^{-a_1 r^2} r^{2l+2} \{ {}_1F_1[n_1, l + [3/2]; a_1 r^2] \}^2 dr$ ,

$I_{21} = \int_{r_0}^{\infty} r^2 \{ h_1^{(+)}(ik_1 r) \}^2 dr$ ,

$l, m$  - соответственно орбитальное и магнитное квантовые числа,  ${}_1F_1$  - вырожденная гипергеометрическая функция первого рода,  $h_1^{(+)}$  - функция Ганкеля мнимого аргумента,  $Y_{lm}$  - шаровые функции. Постоянные  $C_1$  и  $A_1$  определяются из условий нормировки и

непрерывности логарифмических производных функций  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  в точке  $r = r_0$ . Соответствующий  $E_{nl}$  энергетический спектр беспримесной задачи можно определить из условия  $[1/(\mu_1)][(\Psi_1')/(\Psi_1)]|_{r=r_0} = [1/(\mu_2)][(\Psi_2')/(\Psi_2)]|_{r=r_0}$ .

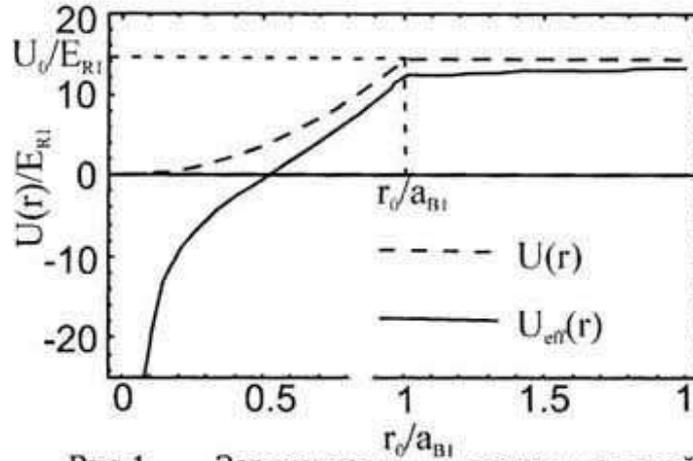


Рис.1. Зависимость потенциальной энергии электрона от  $r$ , для  $x = 0.1$ ,  $r_0 = a_{B1}$  (в эффективных боровских единицах для среды  $GaAs$   $a_{B1} = \hbar^2 / \mu_1 \alpha \approx 100 \text{ \AA}$ ,  $E_{R1} = \alpha / 2a_{B1} \approx 5.2$  (мэВ)).

Далее, для обсуждаемой задачи пробные вариационные волновые функции основного состояния будем рассматривать в виде

$$\Psi_v(r) = \begin{cases} \Psi_{v1}(r) = \frac{C_v}{\sqrt{4\pi}} e^{-[(a_1 r^2)/2]} {}_1F_1 \left[ \begin{matrix} 3 \\ 2 \end{matrix}; a_1 r^2 \right] e^{-\lambda[r/(a_{B1})]}, & r < r_0 \\ \Psi_{v2}(r) = \frac{C_v A_v A_0}{\sqrt{4\pi}} \frac{e^{-k_0 r}}{k_0 r} e^{-\lambda[r/(a_{B1})]}, & r \geq r_0 \end{cases} \quad (5)$$

где мы учли, что  $h_0^{(+)}(\rho) = [(e^{i\rho})/(\rho)]$ , а  $A_0 = e^{-[(a_1)/2]r_0^2} k_0 r_0 [({}_1F_1[n_0, [3/2]; a_1 r_0^2]) / (e^{-k_0 r_0})]$ ,  $\lambda$  - вариационный параметр,  $A_v = \exp(-\lambda[(r_0)/(a_{B1})](1 - a_{B1}/a_{B2}))$ ,  $a_{B2} = [(\mu_1)/(\mu_2)]a_{B1}$  - эффективный боровский радиус в среде из  $Ga_{1-x}Al_xAs$ . Постоянная нормировки  $C_v$  выражается через вариационный параметр  $\lambda$  посредством соотношения

$$C_v^2 = \frac{1}{I_{v1} + A_v^2 A_0^2 I_{v2}}, \quad (6)$$

где

$$I_{v1} = \int_0^{r_0} e^{-a_1 r^2 - 2\lambda[r/(a_{B1})]} r^2 \left\{ {}_1F_1 \left[ \begin{matrix} 3 \\ 2 \end{matrix}; a_1 r^2 \right] \right\}^2 dr, \quad I_{v2} = \frac{1}{k_0^2} \int_{r_0}^{\infty} e^{-2r(k_0 + \lambda[1/(a_{B2})])} dr. \quad (7)$$

Определив энергию системы как

$$E_v = \int_{0 < r < r_0} \Psi_{v1}^* \hat{H}_1 \Psi_{v1} d\vec{r} + \int_{r_0 < r < \infty} \Psi_{v2}^* \hat{H}_2 \Psi_{v2} d\vec{r}, \quad (8)$$

где  $\hat{H}_{1,(2)} = \hat{H}_{01,(2)} - \alpha/r$ ,  $\hat{H}_{01,(2)}$  - гамильтониан беспримесной задачи в области  $r < r_0$  ( $r \geq r_0$ ), и подставляя выражения для волновых функций (5) в (8), после преобразований для  $E_v$  получим

$$E_v = E_0 + \frac{\hbar^2 \lambda^2 C_v^2}{2\mu_1 a_{B1}^2} \left( I_{v1} + A_v^2 A_0^2 \frac{a_{B1}}{a_{B2}} I_{v2} \right) - \alpha^2 C_v^2 (I_{v3} + A_v^2 A_0^2 I_{v4}), \quad (9)$$

где

$$I_{v3} = \int_0^{r_0} r e^{-a_1 r^2 - 2\lambda[r/(a_{B1})]} \left\{ {}_1F_1 \left[ \begin{matrix} 3 \\ 2 \end{matrix}; a_1 r^2 \right] \right\}^2 dr, \quad I_{v4} = \frac{1}{k_0^2} \int_{r_0}^{\infty} \frac{1}{r} e^{-2(k_0 + \lambda[1/(a_{B2})])r} dr. \quad (10)$$

3. На рис. 2 представлен график зависимости энергии основного состояния примеси от радиуса КТ, ограничивающий потенциал которой имеет вид (1) (кривая 1). Для сравнения на том же рисунке представлена аналогичная зависимость для примеси, находящейся в КТ с прямоугольным ограничивающим потенциалом конечной высоты [8-10]. Из рисунка следует, что основной уровень данной задачи лежит выше соответствующего уровня примеси в КТ с прямоугольным ограничивающим потенциалом. С ростом  $r_0$  энергия примеси уменьшается, стремясь к значению  $-E_{R1}$  при  $r_0 \rightarrow \infty$  [8]. При этом разность энергий, соответствующих случаям  $\mu_1 = \mu_2$  и  $\mu_1 \neq \mu_2$  (учет разности эффективных масс приводит к опусканию уровня) стремится к нулю. Это обусловлено ослаблением влияния окружающей среды на состояния примесного электрона, локализованного в области центра КТ. Отметим, что для нашей модели эта разница исчезает быстрее, так как при фиксированном радиусе КТ область локализации электрона меньше, чем в случае прямоугольной ямы. Важно учесть также, что возникновение примесных уровней носит пороговый характер, так как о них имеет смысл говорить начиная со значений радиусов КТ, когда в ней имеется связанное состояние при отсутствии примеси. Определив энергию связи примеси  $E_b$  как разность между основной энергией беспримесной задачи  $E_0$  и  $E_v$ , т.е.  $E_b = E_0 - E_v$ , можно построить зависимость  $E_b$  от  $r_0$ . На рис.3 даны графики этих зависимостей для нашего (кривая 1) и прямоугольного (кривая 2) потенциалов. Из них следует, что с уменьшением  $r_0$  энергия связи увеличивается, достигая максимального значения.  $E_b$ , соответствующая нашему случаю, достигает максимального

значения при большем радиусе  $r_0$ , так как из-за формы потенциала электрон раньше "вылетает" из КТ [10]. В то же время для

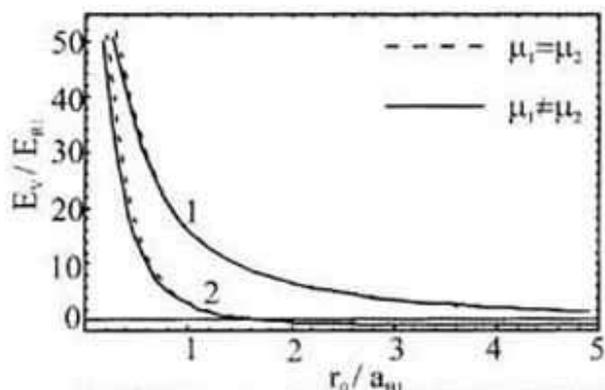


Рис.2. Зависимость энергии электрона от радиуса КТ 1) усеченный параболический потенциал, 2) прямоугольный потенциал ( $x = 0.4$ ).

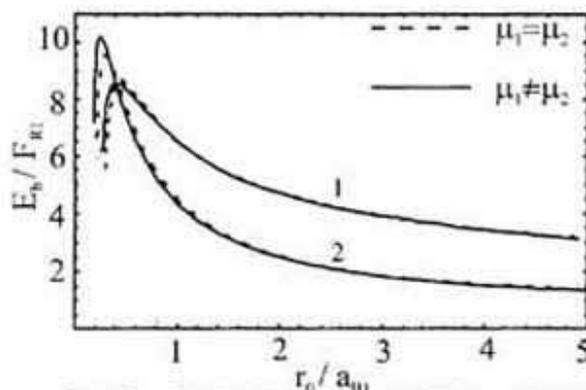


Рис.3. Зависимость энергии связи электрона от радиуса КТ 1) усеченный параболический потенциал, 2) прямоугольный потенциал ( $x = 0.4$ ).

прямоугольной ямы этот радиус меньше, а максимум  $E_b$  больше, так как в этом случае электрон прежде чем «вылететь» из ямы успевает ближе подойти к примесному центру. Аналогичным образом интерпретируется и причина достижения максимума  $E_b$  при больших  $r_0$  для случая  $\mu_1 = \mu_2$  по сравнению со случаем  $\mu_1 \neq \mu_2$ .

а) Ереванский государственный университет

б) Российско-Армянский (Славянский) государственный университет

### Литература

1. Алферов Ж. И.- ФТП. 1998. Т.32. С. 3.
2. Елисеев П. Г. - Квантовая электроника. 2000. Т. 30. Р. 152.
3. Haug H. In: Spectroscopy of systems with spatially confined structures, ed. by B. Di Bartolo [NATO Science Series, Mathematics, Physics and Chemistry. 2003. V.90. P.61].
4. Maksym P., Chakraborty T.- Phys. Rev. Lett. 1990. V. 65. P.108.
5. Peeters F. M. - Phys. Rev. 1990. B42. P. 1486
6. Kazaryan E. M., Petrosyan L. S., Sarkisyan H. A.- 23 International Colloquium on Group Theoretical Methods in Physics, Book of Abstracts. Dubna. 2000. P.74.
7. Niculescu E.- Modern Phys. Letters. 2001. B 15. P. 545.
8. Porras-Montenegro N., Perez-Merchancano S. T. - J. Appl. Phys. 1993. V.74. P.7624.
9. Zhu J. L. et al. - Phys. Rev. 1990. B 41. P. 6001.
10. Bose C., Sarkar C.- Phys. Stat. Sol. 2000. B 218. P. 461.

**Ակադեմիկոս Է. Մ. Ղազարյան, Լ. Ս. Պետրոսյան, Հ. Ա. Սարգսյան**

**Խառնուրդային վիճակները հատած պարաբոլական պոտենցիալով  
քվանտային կետում**

Վարիացիոն եղանակով հետազոտված են խառնուրդային վիճակները հատած պարաբոլական պոտենցիալով քվանտային կետում: Հաշվի է առնված քվանտային կետում և շրջապատող միջավայրում էլեկտրոնի արդյունարար զանգվածների տարբերությունը: Գրաֆիկական եղանակով ստացված են էլեկտրոնի հիմնական վիճակի և նրան համապատասխանող կապի էներգիաների քվանտային կետի շառավղից կախվածությունները: Ստացված արդյունքները համեմատված են վերջավոր ուղղանկյուն պոտենցիալով գնդային քվանտային կետում նմանատիպ արդյունքների հետ: Ցույց է տրված, որ էլեկտրոնի հիմնական վիճակի էներգիան և նրան համապատասխանող կապի էներգիան հատած պարաբոլական պոտենցիալով քվանտային կետում ավելի մեծ են, քան վերջավոր ուղղանկյուն պոտենցիալով գնդային քվանտային կետում: