

УДК 621.315

ПРИМЕСНЫЕ СОСТОЯНИЯ В СФЕРИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ С МОДИФИЦИРОВАННЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ ПЕШЛЯ–ТЕЛЛЕРА

О.Х. ТЕВОСЯН

Российско-Армянский (Славянский) Университет, Ереван

(Поступила в редакцию 25 мая 2012 г.)

Исследованы квантовые состояния и энергетические уровни электрона в сферической квантовой точке с модифицированным потенциалом Пешля–Теллера. Получены аналитические выражения для волновой функции и энергии частицы при отсутствии примесного центра. В рамках вариационного метода исследованы примесные состояния и численными методами получены зависимости энергии частицы от параметров сферической квантовой точки. Выявлена зависимость энергии связи электрона от полуширины и глубины потенциальной ямы.

1. Введение

Интерес к полупроводниковым квантовым точкам (КТ) в последнее время продолжает расти, что обусловлено новыми физическими свойствами этих нульмерных объектов, которые в основном являются следствием размерного квантования носителей заряда в них [1,2]. Много теоретических и экспериментальных работ в этой области посвящено рассмотрению эллипсоидальных, пирамидальных, цилиндрических и линзообразных КТ [3-7]. Во время роста КТ, в результате диффузии, формирующийся ограничивающий потенциал в большинстве случаев с большой точностью аппроксимируется параболическим потенциалом. В действительности, однако, параболический потенциал реализуется только для нижних энергетических уровней. Очевидно, что с ростом квантового числа ход ограничивающего потенциала расходится от параболического. Для более успешной и реалистичной аппроксимации формируемого ограничивающего потенциала было предложено использование модифицированного потенциала Пешля–Теллера (МППТ) [6,7]. Другим классом задач является теоретическое изучение оптических характеристик КТ, содержащих примесные центры. Наличие примесных центров в полупроводниковых КТ может существенным образом повлиять на их физические свойства [8-12].

В настоящей работе исследованы электронные и примесные состояния в сферической КТ с МППТ.

2. Электронные состояния

Рассмотрим движение электрона в сферической КТ с ограничивающим

МППТ. Потенциальная энергия электрона в декартовых координатах запишется в виде

$$U(X, Y, Z) = \sum_{i=1}^3 \left(\tilde{U}_i - \frac{\tilde{U}_i}{\cosh^2(Q_i/\tilde{\beta}_i)} \right), \quad (1)$$

где $\tilde{U}_i$ и $\tilde{\beta}_i$ – соответственно, глубина и полуширина потенциальной ямы, а $i=1, 2, 3$ и $Q_i = X, Y, Z$ [13]. Вид МППТ в зависимости от полуширины и глубины потенциальной ямы, приведен на рис.1а и б. Связь между радиусом сферической КТ и полушириной потенциальной ямы задается в виде $R = \gamma_i \tilde{\beta}_i$, где параметр γ_i определяется из эксперимента.

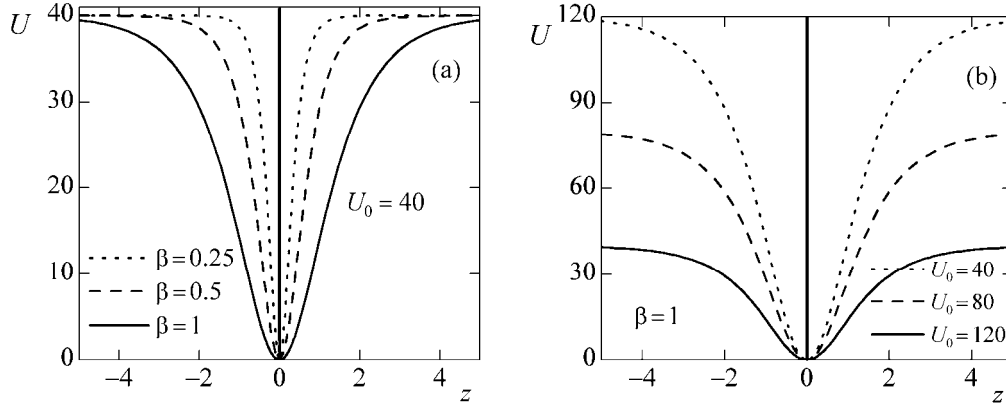


Рис.1. а) Модифицированный потенциал Пешля–Теллера для различных значений полуширины потенциальной ямы, б) для различных значений глубины потенциальной ямы.

Гамильтониан системы в безразмерных величинах можно представить в виде суммы гамильтонианов подсистем:

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^3 \hat{H}_i, \quad (2)$$

где

$$\hat{H}_i = -\partial^2/\partial q_i^2 - U_i/\cosh^2(q_i/\beta_i). \quad (3)$$

Здесь введены обозначения $\hat{H}_i = \hat{H}_i/E_R$, $q_i = Q_i/a_B$, $q_i = x, y, z$, $U_i = \tilde{U}_i/E_R$, $\beta_i = \tilde{\beta}_i/a_B$, $E_R = \hbar^2/2m_e^*a_B^2$ – эффективная энергия Ридберга, $a_B = \kappa\hbar^2/m_p^*e^2$ – эффективный боровский радиус электрона, κ – диэлектрическая проницаемость, m_e^* – эффективная масса электрона, e – заряд электрона.

Полную волновую функцию системы ищем в виде

$$\Phi_0(x, y, z) = \prod_{i=1}^3 \Psi_i(q_i). \quad (4)$$

Тогда задача сводится к нахождению электронных состояний подсистем по отдельности. После подстановки волновых функций подсистем в соответствующее уравнение Шредингера и введя новые обозначения $\xi_i = \tanh(r/\beta_i)$, $s_i = (1/2) \left[-1 + \sqrt{1 + 4\beta_i^2 U_i} \right]$, получаем следующие уравнения:

$$\frac{d}{d\xi_i} \left[(1 - \xi_i^2) \frac{d\Psi_i(\xi_i)}{d\xi_i} \right] + \left[s_i(s_i + 1) - \frac{\varepsilon_i}{1 - \xi_i^2} \right] \Psi_i(\xi_i) = 0, \quad (5)$$

где введено обозначение $\varepsilon_i = E_i/E_R$. Решение уравнения (5) ищем в виде $\Psi_i(\xi_i) = (1 - \xi_i^2)^{\varepsilon_i/2} \Omega(\xi_i)$ и тогда для $\Omega(\xi_i)$ получаем уравнение Куммера [14]:

$$\begin{aligned} & \frac{1 - \xi_i}{2} \left(1 - \frac{1 - \xi_i}{2} \right) \Omega''(\xi_i) + (\varepsilon_i + 1) (1 - 2s_i) \Omega'(\xi_i) - \\ & - (\varepsilon_i - s_i) (\varepsilon_i + s_i + 1) \Omega(\xi_i) = 0, \end{aligned} \quad (6)$$

решение которого задается гипергеометрической функцией Гаусса:

$$\Omega(\xi_i) = {}_2F_1 \left\{ \varepsilon_i - s_i, \varepsilon_i + s_i + 1, \varepsilon_i + 1, \frac{1 - \xi_i}{2} \right\}. \quad (7)$$

Окончательно, волновая функция системы примет следующий вид:

$$\Phi_0(x, y, z) = \prod_{i=1}^3 \left(1 - \tanh^2 \left(\frac{q_i}{\beta_i} \right) \right)^{\frac{\varepsilon_i}{2}} {}_2F_1 \left\{ \varepsilon_i - s_i, \varepsilon_i + s_i + 1, \varepsilon_i + 1, \frac{1 - \tanh(q_i/\beta_i)}{2} \right\}, \quad (8)$$

а энергетический спектр будет определяться выражением

$$\varepsilon_0 = \sum_{i=1}^3 \left(U_i - \frac{1}{4\beta_i^2} \left[-(1 + 2n_i) + \sqrt{1 + 4\beta_i^2 U_i} \right]^2 \right), \quad (9)$$

где n_i – квантовые числа, которые принимают значения $n_i = 0, 1, 2, \dots$

3. Примесные состояния и энергия связи

Рассмотрим теперь движение электрона в сферической КТ с МППТ при наличии примесного центра. В качестве упрощения будем считать, что примесь расположена в центре КТ ($q_i = 0$). Тогда потенциальная энергия электрона запишется в виде

$$\tilde{U}(X, Y, Z) = \sum_{i=1}^3 \left(\tilde{U}_i - \frac{\tilde{U}_i}{\cosh^2 \left(\frac{Q_i}{\tilde{\beta}_i} \right)} \right) - \frac{e^2}{\kappa \sqrt{\sum_{i=1}^3 Q_i^2}}. \quad (10)$$

Гамильтониан системы в безразмерных величинах для основного состояния запишется в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}. \quad (11)$$

Так как уравнение Шредингера с гамильтонианом (11) не имеет точного решения, то задачу о нахождении волновой функции и энергетического спектра электрона в основном состоянии в сферической КТ с МППТ решим вариационным методом [13]. Пробную волновую функцию ищем в виде

$$\Phi(x, y, z) = A(\lambda) \Phi_0(x, y, z) e^{-\lambda \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}, \quad (12)$$

где $A(\lambda)$ – нормировочная константа, λ – вариационный параметр, а функция $\Phi_0(x, y, z)$ является решением уравнения Шредингера без наличия примеси (см. формулу (8)). Нормировочный коэффициент $A(\lambda)$ зависит от вариационного параметра λ . Из условия нормировки волновой функции нормировочный коэффициент $A(\lambda)$ можно представить в следующем виде:

$$A(\lambda) = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_0^2(x, y, z) e^{-2\lambda \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} dx dy dz \right)^{-1/2}. \quad (13)$$

Далее, следуя технике вариационного метода расчета для энергии частицы, запишем

$$\varepsilon(\lambda) = \int \Phi^*(x, y, z) \hat{H} \Phi(x, y, z) dx dy dz. \quad (14)$$

Энергия $\varepsilon(\lambda)$ определяется численными методами, так как входящие в уравнение (14) интегралы невозможно аналитически рассчитать. Из минимизации энергии $\varepsilon(\lambda)$ окончательно находим энергию электрона ε_{imp} в сферической КТ с МППТ с примесным центром. Определяя энергию связи, как разницу энергий частицы без примеси и с примесью, получим:

$$\varepsilon_{\text{bind}} = \varepsilon_0 - \varepsilon_{\text{imp}} = \sum_{i=1}^3 \left(U_i - \frac{1}{4\beta_i^2} \left[-1 + \sqrt{1 + 4\beta_i^2 U_i} \right]^2 \right) - \varepsilon_{\text{imp}}. \quad (15)$$

4. Обсуждение

Перейдем к обсуждению полученных результатов. На рис.2а и б приведены зависимости энергии электрона от полуширины и глубины потенциальной ямы. Отметим, что численные расчеты сделаны для сферической КТ из GaAs со следующими параметрами: $\mu_e = 0.067m_e$, $\kappa = 13.8$, $E_R = 5.275$ мэВ, $a_B = 104$ Å. Все нижеприведенные расчеты сделаны для случая, когда параметры сферической КТ по всем направлениям одинаковы ($\beta_1 = \beta_2 = \beta_3 \equiv \beta$ и $U_1 = U_2 = U_3 \equiv U_0$). Как видно из рис.2а, с уменьшением полуширины потенциальной ямы энергия электрона увеличивается, что является следствием увеличения вклада размерного квантования. Это означает, что область локализации электрона в сферической КТ уменьшается. Нужно отметить, что с уменьшением полуширины потенциальной ямы, увеличиваются также межуровневые расстоя-

ния энергии. Обратная картина наблюдается при изменении глубины потенциальной ямы: с уменьшением глубины потенциальной ямы энергия электрона уменьшается, а энергетические уровни сближаются. Это обусловлено тем, что уменьшается вклад размерного квантования в энергию электрона.

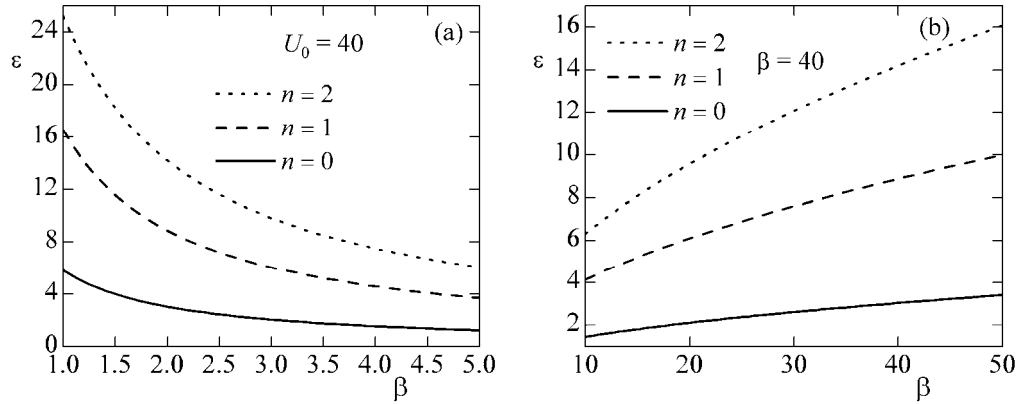


Рис.2. Зависимость энергии электрона в сферической квантовой точке от полуширины (а) и глубины (б) модифицированного потенциала Пешля–Теллера.

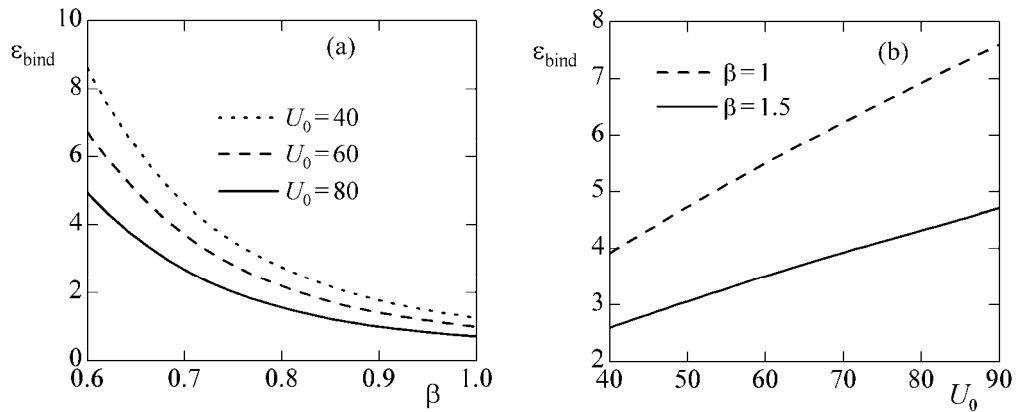


Рис.3. Зависимость энергии связи частицы в сферической квантовой точке от полуширины (а) и глубины (б) потенциальной ямы.

На рис.3а приведена зависимость энергии связи электрона в сферической КТ при наличии примеси от полуширины МППТ, при разных фиксированных значениях глубины потенциальной ямы. Как видно из рисунка, с уменьшением β_i энергия связи частицы возрастает, что является следствием увеличения эффекта размерного квантования. Отметим также, что кривые, соответствующие большим значениям глубины потенциальной ямы, расположены выше. Обратная картина наблюдается для зависимости энергии связи электрона от глубины потенциальной ямы: с уменьшением параметра U_i энергия связи убывает.

Эта зависимость приведена при различных фиксированных значениях полуширины потенциальной ямы на рис.3b. Здесь кривые, соответствующие большим значениям фиксированного параметра β_i , расположены ниже из-за уменьшения эффекта размерного квантования.

Отметим, что в сферической КТ с МППТ энергетические уровни существуют, когда реализуется условие $U_i \geq 1/\beta_i^2$.

В заключение автор выражает благодарность академику Э.М. Казаряну и к.ф.-м.н. Д.Б. Айрапетяну за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. **P.Harrison**. Quantum wells, wires and dots. Theoretical and computational physics. New York, Wiley, 2005.
2. Self-Assembled InGaAs-GaAs Quantum Dots. **R.K.Willardson, E.R.Weber**, eds. San Diego, Academic Press, 1999.
3. **A.A.Gusev, O.Chuluunbaatar, S.L.Vinitsky, E.M.Kazaryan, H.A.Sarkisyan**. J. Phys.: Conf. Series, **248**, 012047 (2010).
4. **Д.Б.Айрапетян**. Изв. НАН Армении, Физика, **42**, 442 (2007).
5. **Е.М.Kazaryan, L.S.Petrosyan, H.A.Sarkisyan**. Int. J. Mod. Phys. B, **15**, 4103 (2001).
6. **Д.Б.Айрапетян, К.Г.Двоян, Э.М.Казарян, О.Х.Тевосян**. Труды международной конференции Роснано-2009, Москва, октябрь 6-8, 2009, с. 10.
7. **Д.Б.Айрапетян, К.Г.Двоян, Э.М.Казарян, А.А.Чанчапаян**. ДАН РА, **108**, 320 (2008).
8. **А.М.Казарян, Э.М.Казарян**. ФТП, **7**, 1383 (1977).
9. **G.Bastard**. Phys. Rev. B, **24**, 4714 (1981).
10. **L.E.Oliveira, R.Perez-Alvarez**. Phys. Rev. B, **40**, 10460 (1989).
11. **Е.М.Kazaryan, A.A.Kostanyan, H.A.Sarkisyan**. Physica E, **28**, 423 (2005).
12. **Е.М.Kazaryan, A.A.Kostanyan, H.A.Sarkisyan**. J. Phys.: Cond. Matt., **19**, 046212 (2007).
13. **Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц**. Квантовая механика. М., Наука, 1989.
14. Справочник по специальным функциям. Под ред. **М.Абрамовица, И.Стиган**. М., Наука, 1979.

IMPURITY STATES IN A SPHERICAL QUANTUM DOT WITH A MODIFIED PÖSCHEL–TELLER POTENTIAL

H.Kh. TEVOSYAN

Quantum states and energy levels of an electron in a spherical quantum dot with a modified Pöschel–Teller potential are studied. Analytical expressions for the wave function and energy of particle in the absence of impurity are obtained. Within the framework of variational method the impurity states are studied and by using numerical methods the dependences of the particle energy on the parameters of the spherical quantum dot are derived. Dependences of the electron binding energy on the half-width and depth of the potential wall are revealed.