Известия НАН Армении, Физика, т.34, №3, с.154-161 (1999)

УДК 621.315.592

СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОНА В СТУПЕНЧАТОЙ БЕСКОНЕЧНО ГЛУБОКОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

М. М. АГАСЯН, А. А. КИРАКОСЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 8 января 1999 г.)

Рассмотрены состояния электрона в размерно-квантованной полупроводниковой проволоке с покрытием в однородном магнитном поле, направленном вдоль оси проволоки. Найдены волновые функции и получено уравнение для определения собственных значений энергии, зависящих как от параметров проволоки и покрытия, так и от напряженности магнитного поля. Вариационным методом вычислена энергия связи водородоподобной примеси, находящейся на оси проволоки, и показано, что эта энергия увеличивается с возрастанием напряженности магнитного поля.

1. Введение

Влияние магнитного поля на свойства низкоразмерных электронных систем проявляется в различных физических явлениях, имеющих как фундаментальное значение для физической теории [1], так и большое прикладное значение. Сочетание возможностей современной экспериментальной техники получения магнитных полей с напряженностью до 1000 Т [2] с возможностями технологий в области создания низкоразмерных полупроводниковых структур с различными геометрическими формами [3,4] открывает широкие перспективы в области управления свойствами таких систем и создания на их основе новых функциональных устройств наноэлектроники.

Исследование влияния магнитного поля на состояние электрона в размерно-квантованной полупроводниковой проволоке в рамках модели бесконечно глубокой потенциальной ямы проведено в [5,6]. Аналогичная задача в случае потенциальной ямы конечной глубины рассмотрена в [7], где рассчитана также энергия связи заряженной примеси.

В данной работе, в рамках предложенной в [8] модели ступенчатой бесконечно глубокой ямы (СБЯ), рассмотрена задача определения спектра и волновых функций электрона в магнитном поле, направленном вдоль оси проволоки. Вычислена также энергия связи водородоподобной примеси, находящейся на оси проволоки, в зависимости от величины магнитного поля и характерных параметров рассматриваемой модели.

2. Волновые функции и спектр энергии

Рассмотрим состояния электрона в проволоке радиуса R_1, покрытой слоем толщины $R_2 - R_1$, в магнитном поле, направленном вдоль оси проволоки (ось z). В приближении метода эффективной массы гамильтониан задачи имеет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_i}\left[\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r})\right]^2 + V(\mathbf{r}), \tag{1}$$

где m_i — эффективная масса электрона в проволоке ($i = 1$) и в слое ($i = 2$), $\hat{\mathbf{p}}$ – оператор импульса электрона, $\mathbf{A}(\mathbf{r})$– вектор-потенциал магнитного поля. В рамках модели СБЯ потенциальная энергия $V(\mathbf{r})$ имеет вид

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, & r < R_1, \\ V_0, & R_1 \le r \le R_2, \\ \infty, & r > R_2, \end{cases} \tag{2}$$

где V_0 — величина скачка потенциальной энергии на границе проволоки и покрывающего слоя. В случае постоянного и однородного магнитного поля вектор-потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = [\mathbf{H}, \mathbf{r}]/2$, где $\mathbf{H} \equiv \mathbf{H}(0,0,H)$, и, следовательно, в цилиндрической системе координат от нуля отлична только компонента $\mathbf{A}_\varphi = Hr/2$.

Решения уравнения Шредингера с гамильтонианом (1), в котором $V(\mathbf{r})$ дается соотношением (2), можно представить в форме

$$\Psi_{nlk}(r,\varphi,z) = \frac{C_1}{a_c\sqrt{2\pi L}}\exp[i(l\varphi + kz)]x^{|l|/2}\exp\left(-\frac{x}{2}\right)\times$$
$$\times\begin{cases} F\left(-\alpha_{n,|l|}, |l|+1; x\right), & x < x_1, \\ C_2F\left(-\beta_{n,|l|}, |l|+1; x\right) + C_3U\left(-\beta_{n,|l|}, |l|+1; x\right), & x_1 \le x \le x_2, \\ 0, & x > x_2, \end{cases} \tag{3}$$

где L – длина проволоки, k – волновое число, $n = 0,1,2,\dots$, $l = 0,\pm1,\pm2,\dots$, – квантовые числа, $F(a,b;x)$ и $U(a,b;x)$ – вырожденные гипергеометрические функции [9], $a_c = \sqrt{\hbar c / eH}$ – магнитная длина, $x = r^2/2a_c^2$. Входящие в (3) постоянные нормировки C_j ($j = 1,2,3$) даются выражениями

$$C_1 = \left\{\int_0^{x_1} dx e^{-x} x^{|l|} F^2\left(-\alpha_{n,|l|}, |l|+1; x\right) + \right.$$
$$\left. + \int_{x_1}^{x_2} dx e^{-x} x^{|l|}\left[C_2F\left(-\beta_{n,|l|}, |l|+1; x\right) + C_3U\left(-\beta_{n,|l|}, |l|+1; x\right)\right]^2\right\}^{-\frac{1}{2}}, \tag{4}$$

$$C_2 = \frac{F(-\alpha_{n,|l|}, |l|+1; x_1)U(-\beta_{n,|l|}, |l|+1; x_2)}{F(-\beta_{n,|l|}, |l|+1; x_1)U(-\beta_{n,|l|}, |l|+1; x_2) - F(-\beta_{n,|l|}, |l|+1; x_2)U(-\beta_{n,|l|}, |l|+1; x_1)}, \quad (5)$$

$$C_3 = -C_2 \frac{F(-\beta_{n,|l|}, |l|+1; x_2)}{U(-\beta_{n,|l|}, |l|+1; x_2)}, \quad (6)$$

где

$$x_1 = \frac{R_1^2}{2a_c^2}, \qquad x_2 = \frac{R_2^2}{2a_c^2}. \quad (7)$$

Собственные значения энергии даются выражениями

$$E_{nlk} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1} + \hbar\omega_c\left(\alpha_{n,|l|} + \frac{|l| + l + 1}{2}\right), \quad (8)$$

где $\omega_c = eH/m_1c$ – циклотронная частота. Квантовые числа $\beta_{n,|l|}$ выражаются через $\alpha_{n,|l|}$ из условия

$$\hbar\omega_c\left(\alpha_{n,|l|} + \frac{|l| + l + 1}{2}\right) = V_0 + \hbar\omega_c \frac{m_1}{m_2}\left(\beta_{n,|l|} + \frac{|l| + l + 1}{2}\right). \quad (9)$$

Квантовые числа $\alpha_{n,|l|}$ определяются из условия непрерывности логарифмической производной волновой функции при $r = R_1$ и являются корнями уравнения

$$\frac{1}{m_1}\frac{d}{dx_1}\ln\left[e^{-\frac{x_1}{2}} x_1^{\frac{|l|}{2}} F\left(-\alpha_{n,|l|}, |l|+1; x_1\right)\right] =$$

$$= \frac{1}{m_2}\frac{d}{dx_1}\ln\left\{e^{-\frac{x_1}{2}} x_1^{\frac{|l|}{2}} \left[C_2 F\left(-\beta_{n,|l|}, |l|+1; x_1\right) + C_3 U\left(-\beta_{n,|l|}, |l|+1; x_1\right)\right]^2\right\}. \quad (10)$$

3. Расчет энергии связи

Воспользуемся вариационным методом для определения энергии связи водородоподобного центра, находящегося на оси проволоки. Потенциальная энергия электрона в поле примесного центра дается выражением

$$U(r,z) = \frac{-e^2}{\chi\sqrt{r^2 + z^2}}, \quad (11)$$

где предположено, что проволока и покрытие имеют одинаковые диэлектрические постоянные: $\chi_1 = \chi_2 \equiv \chi$.

Пробную волновую функцию основного состояния, следуя [10], выберем в виде

$$\Psi_0 = N\exp(ikz)\exp\left(-\frac{x}{2}\right)\exp\left(-\lambda\sqrt{r^2+z^2}\right)\times$$
$$\times\begin{cases} F(-\alpha,1;x), & x<x_1, \\ C_2F(-\beta,1;x)+C_3U(-\beta,1;x), & x_1\le x\le x_2, \\ 0, & x>x_2, \end{cases} \quad (12)$$

где λ — вариационный параметр, N — постоянная нормировки, $\alpha\equiv\alpha_{1,0}$, $\beta\equiv\beta_{1,0}$.

Энергию связи примеси (E_b) определим как разность энергии основного состояния системы без примеси (E_{100}) и энергии основного состояния с примесью (E_0):

$$E_b = E_{100} - E_0. \quad (13)$$

После несложных расчетов для энергии связи водородоподобной примеси получаем выражение

$$\frac{E_b}{E_R} = -\gamma^2 + 2\frac{f_0+g_0}{f_1+g_1} - \gamma\frac{1-m_1/m_2}{f_1+g_1}\left[t_1^2e^{-\nu t_1^2}F^2\left(-\alpha,1;\nu t_1^2\right)K_0(2\gamma t_1)-\gamma g_1\right], \quad (14)$$

где введены следующие обозначения: $\gamma=\lambda a_B$, a_B и E_R – эффективный боровский радиус и ридберговская энергия в проволоке, соответственно,

$$f_j(t_1,\alpha,\gamma,\nu)=\int_0^{t_1} e^{-\nu t^2}F^2\left(-\alpha,1;\nu t^2\right)K_j(2\gamma t)t^{j+1}dt, \quad (15)$$

$$g_j(t_1,t_2,\beta,\gamma,\nu)=\int_{t_1}^{t_2} e^{-\nu t^2}\left[C_2F\left(-\beta,1;\nu t^2\right)+C_3U\left(-\beta,1;\nu t^2\right)\right]^2 K_j(2\gamma t)t^{j+1}dt, \quad (16)$$

$t_1=R_1/a_B$, $t_2=R_2/a_B$, $K_j(x)$ – модифицированная функция Бесселя третьего рода j-го порядка ($j=0,1$),

$$\nu=\frac{1}{2}\left(\frac{a_B}{a_c}\right)^2\equiv\frac{H}{2H_0}, \quad (17)$$

где характерная напряженность магнитного поля H_0 определяется параметрами вещества проволоки:

$$H_0=\frac{m_1^2e^3c}{\chi^2\hbar^3}. \quad (18)$$

Для проволоки из $GaAs$ $H_0\approx 6$ Т.

4. Обсуждение результатов

В численных расчетах, проведенных для проволоки из $GaAs$, покрытой слоем из $Ga_{1-x}Al_xAs$, использованы следующие значения

$n=2$ и $n=3$) от радиусов проволоки и покрытия при данных x, Q_e и H. Найдено, что зависимости $\varepsilon_{n0}(R_1)$ и $\varepsilon_{n0}(R_2)$ при $H \neq 0$ имеют те же особенности, что и при $H=0$ [8] (в частности, особенность, связанная с различием масс в проволоке и в покрытии).

На рис.2 представлена зависимость энергии связи от радиуса проволоки для различных значений напряженности магнитного поля при $x=0.3$, $R_2=a_B$, $Q_e=0.6$, $m_2 \neq m_1$ (без учета Г-X смешивания). С ростом H энергия связи растет быстрее в областях $R_1 \leq 0.1a_B$ и $R_1 \geq 0.6a_B$, а в области $0.2a_B \leq R_1 \leq 0.5a_B$ растет медленно. Такое поведение энергии связи является следствием того, что при $0.2a_B \leq R_1 \leq 0.5a_B$ размерное квантование превалирует над магнитным. Минимумы энергии связи для различных H при $R_1 \approx 0.9a_B$ связаны с различием масс электрона в проволоке и в покрытии [8]. С ростом H глубина минимума уменьшается и стремится к нулю, т.к. сильное поле локализует электрон в приосевой области.

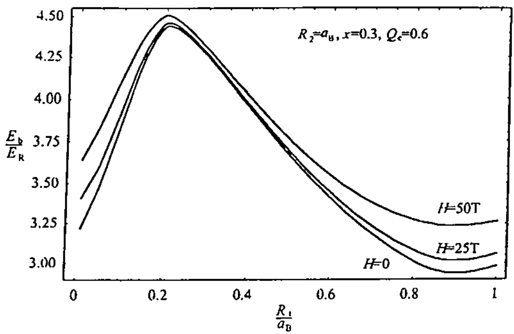

Рис.2. Зависимость энергии связи от радиуса проволоки для различных значений напряженности магнитного поля.

Для фиксированного значения R_1 величина E_b имеет максимум при $R_2=R_1$ и затем резко падает, стремясь к значению, полученному в [7] (т.е. к предельному значению при $R_2 \to \infty$). Кривые, соответствующие большим значениям H, убывают сравнительно быстрее.

На рис.3 представлена зависимость энергии связи примесного центра от напряженности магнитного поля для различных значений параметров задачи.

Из сравнения кривых 1, 4 и 6 следует, что (при данных $R_2=1.5a_B$, $x=0.3$, $Q_e=0.6$) энергия связи растет с уменьшением радиуса проволоки, при этом скорость роста, в зависимости от H, больше при больших радиусах. Из сравнения кривых 2, 3 и 4 видно, что (при данных $R_1=0.75a_B$, $R_2=1.5a_B$, $Q_e=0.6$) энергия связи растет с параметров [11]: $E_R \approx 5.2$ мэВ, $a_B = 104$ Å, $m_1 = 0.067 m_0$, $m_2 = (0.067 + +0.083x)m_0$ (m_0 – масса свободного электрона) и $V_0 = 1.247xQ_e$ эВ (Q_e – доля разрыва потенциальной энергии, приходящаяся на зону проводимости) при изменении концентрации сплава в пределах $0 \le x \le 0.45$.

Следует отметить, что применимость метода эффективной массы в системе $GaAs$-$Ga_{1-x}Al_xAs$ связана с выяснением роли Г-X смешивания. Согласно [12], для V- и T-образных 1D-систем указанный эффект начинает играть определяющую роль при значениях $R < 50$ Å и $x > 0.5$.

На рис.1 представлена зависимость энергии основного состояния электрона $\varepsilon_{10} = E_{100}$ от напряженности магнитного поля. Как видно из рисунка, ε_{10} практически не зависит от напряженности магнитного поля до значений H_0, т.е. при $H \le H_0$ размерное квантование играет определяющую роль ($R_1 < a_c$).

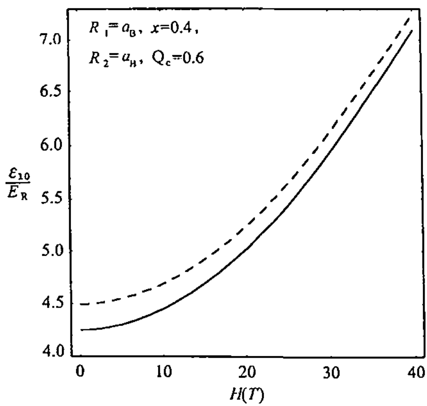

Рис.1. Зависимость энергии основного состояния электрона $\varepsilon_{10} = E_{100}$ от напряженности магнитного поля (прерывистая кривая – $m_1 = m_2$, сплошная кривая – $m_1 \ne m_2$).

Из расчетов следует, что в приближении $m_1 = m_2$ (прерывистая кривая на рис.1) энергия электрона больше, чем при учете различия масс. Как и следовало ожидать, с увеличением напряженности магнитного поля, т.е. с уменьшением размеров области локализации электрона разность $\varepsilon_{10}(m_2 = m_1) - \varepsilon_{10}(m_2 \ne m_1)$ стремится к нулю, что, в свою очередь, означает, что электрон не "чувствует" наличие барьерного слоя. Согласно расчетам, к росту H более чувствительны состояния с $n = 2$, $n = 3$.

Исследованы также зависимости энергических уровней ε_{n0} (для увеличением концентрации x, при этом скорость роста, в зависимости от H, больше при малых значениях концентрации. Роль различия масс в проволоке и в покрытии видна из кривых 4 и 5. Из расчетов следует, что даже при $H = 40$ Т неточность, вводимая приближением $m_2 \approx m_1$, такая же, как и при $H = 0$.

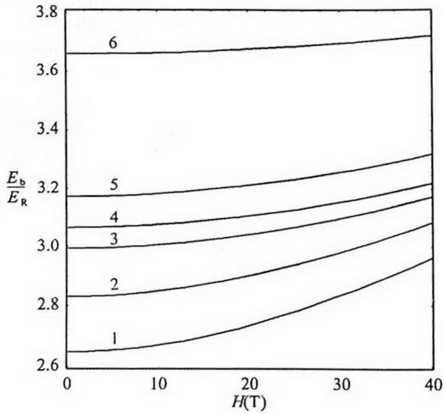

Рис.3. Зависимость энергии связи примесного центра от напряженности магнитного поля для различных значений параметров задачи: $R_2 = 1.5a_B$, $Q_e = 0.6$; 1. $R_1 = a_B$, $x = 0.3$. 2. $R_1 = 0.75a_B$, $x = 0.1$. 3. $R_1 = 0.75a_B$, $x = 0.2$. 4. $R_1 = 0.75a_B$, $x = 0.3$. 5. $R_1 = 0.75a_B$, $x = 0.3$, $m_2 = m_1$. 6. $R_1 = 0.5a_B$, $x = 0.3$.

Из модельных расчетов следует, что при $H = 80$ Т кривые 2, 3 и 4 сходятся, а при $H = 150$ Т сходятся все кривые, что означает превалирование магнитного квантования над размерным.

ЛИТЕРАТУРА

1. The Quantum Hall Effect. 2nd ed., edited by **R.E.Prange** and **S.M.Girvin**. Springer, New York, 1990.
2. **J.S.Brooks**, **L.Engel**, et al. Physica B, **246–247**, 50 (1998).
3. **W.Wegschneider**, **L.N. Pfeiffer**, **M.M. Dignam**, **A. Pinchuk**, **K.W. West**, **S.L. McCall**, and **R.Hull**. Phys. Rev. Lett., **71**, 4071 (1993).
4. **H.Akiyama**, **T.Someya**, and **H.Sakaki**. Phys. Rev. **B**, **53**, R10520 (1996).
5. **M.E.Rensink**. Am. J. Phys., **37**, 900 (1996).
6. **Б.А.Тавгер**, **М.Д.Блох**, **Е.Л.Фишман**. ФММ, **33**, 1137 (1972).
7. **S.V.Branis**, **Gang Li**, and **K.K.Bajaj**. Phys. Rev. **B**, **47**, 1316 (1993).
8. **М.М.Агасян**, **А.А.Киракосян**. Известия НАН Армении, Физика, **34**, 17 (1999).
9. **Г.Бейтман**, **А.Эрдейи**. Высшие трансцендентные функции, том 1. М., Наука, 1974.

10. **J.W.Brown**, and **H.N.Spector**. J. Appl. Phys., **59**, 1179 (1986).
11. **S.Adachi**. J. Appl. Phys., **58**, R1 (1985).
12. **S.Pescetelli**, **A.Di Carlo**, and **P.Lugli**. Phys. Rev. **B**, **56**, R1668 (1997).

ԷԼԵԿՏՐՈՆԻ ՎԻՃԱԿՆԵՐՆ ԱՆՎԵՐՋ ԽՈՐ ԱՍՏԻՃԱՆԱՅԻՆ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼ ՓՈՍՈՒՄ ՄԱԳՆԻՍԱԿԱՆ ԴԱՇՏՈՒՄ

Մ. Մ. ԱՂԱՍՅԱՆ, Ա. Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ

Դիտարկված են էլեկտրոնի վիճակները չափայնորեն քվանտացված, ծածկույթով կիսահաղորդչային լարում, որը գտնվում է լարի առանցքով ուղղված համասեռ մագնիսական դաշտում: Որոշված են ալիքային ֆունկցիաները և ստացված է հավասարում էներգիայի սեփական արժեքները որոշելու համար, որոնք կախված են ինչպես լարի և ծածկույթի բնութագրերից, այնպես էլ մագնիսական դաշտի լարվածությունից: Վարիացիոն եղանակով հաշված է լարի առանցքի վրա գտնվող ջրածնանման կապի էներգիան և ցույց է տրված, որ այն մագնիսական դաշտի լարվածության աճից կախված մեծանում է:

ELECTRON STATES IN A STAIRCASE INFINITELY DEEP WELL IN A MAGNETIC FIELD

M. M. AGHASYAN, A. A. KIRAKOSYAN

The electron states in a size-quantized coated semiconductor wire in a uniform magnetic field applied parallel to the wire axis are considered. The wave functions are found and the equation for determination of energy eigenvalues depending both on the magnetic field and parameters of the wire and coating is obtained. The binding energy of a hydrogen-like impurity located on the wire axis is computed by the variational method, and it is shown that this energy increases with the increase of the magnetic field.