УДК 539.21

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР УЗКОЩЕЛЕВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

Ш. У Нуцалов, А. П. Силин

Получено уравнение, определяющее спектр электронов и дырок в узкощелевой полупроводниковой квантовой точке. Для малых значений момента уравнение решено численно.

В последнее время в связи с проблемами миниатюризации приборов полупроводниковой электроники и оптоэлектроники существенно вырос интерес к теоретическому и экспериментальному исследованию квантовых точек [1 – 5].

Квантовая точка представляет собой нанометровое включение одного полупроводника (с меньшей щелью) в другом и является квазинульмерной системой, в которой движение носителей квантовано по всем направлениям. Последние достижения полупроводниковой электроники позволяют вырастить квантовые точки из различных полупроводников (в том числе и узкощелевых) и различных размеров (обычно $\sim 10{-}100$ Å) [6, 7].

В настоящей работе для исследования энергетического спектра узкощелевых квантовых точек мы используем двухзонное приближение, которое хорошо описывает соединения типа $A^{IV}B^{VI}$ и качественно может использоваться для соединений типа $A^{III}B^{V}$ [8]. Более точная трехзонная модель полупроводника, лучше описывающая полупроводники группы алмаза и цинковой обманки, не может, по-видимому, дать принципиально новых результатов, однако существенно усложняет расчеты. В рамках используемого нами подхода квантовую точку можно описать с помощью дираковского гамильтониана H, в котором роль скорости света играет матричный элемент скорости межзонных переходов v [9].

$$H\Psi = (v\gamma^0\vec{\gamma}\cdot\mathbf{p} + \gamma^0\Delta(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}))\Psi = E\Psi, \qquad (1)$$

где Ψ – биспинор, γ^0, $\vec{\gamma}$ – матрицы Дирака, $\mathbf{p} = -i\vec{\nabla}$ – оператор импульса (для краткости мы положим $\hbar = 1$); 2Δ – ширина запрещенной зоны и V – работа выхода, которые могут изменяться в пространстве.

Энергия носителей тока в рассматриваемой нами модели слабо зависит от формы (шар, цилиндр, куб и т.д.), поэтому мы рассмотрим упрощенную сферически-симметричную модель квантовой точки в виде шара с радиусом r_0 из одного полупроводника с параметрами v, Δ, $V = 0$, заключенного в другом полупроводнике с параметрами v_0, $\Delta_0 > \Delta > 0$, V_0. Подобная система для случая инвертированных зон ($\Delta\Delta_0 < 0$) была рассмотрена в работе [9]. Влияние конечности энергетической щели на энергетический спектр было рассмотрено в работе [1] для случая $\Delta_0 >> \Delta$.

Решение уравнения Дирака в сферическом случае характеризуется числами j, l, m [10]:

$$H\Psi_{E,j,l,m}(\mathbf{r}) = E\Psi_{E,j,l,m}(\mathbf{r}), \tag{2}$$

где $j(j+1)$, $l(l+1)$, m – собственные значения квадрата полного момента, квадрата орбитального момента и проекции момента соответственно.

Мы ограничимся рассмотрением уровней размерного квантования

$$E^2 > \Delta^2,\ (E-V)^2 < \Delta_0^2, \tag{3}$$

приграничных уровней

$$E^2 < \Delta^2,\ (E-V)^2 < \Delta_0^2 \tag{4}$$

и опустим менее интересный случай непрерывного спектра

$$E^2 > \Delta^2,\ (E-V)^2 > \Delta_0^2. \tag{5}$$

Решение уравнения Дирака удобно записать в следующем виде [10]:

$$\Psi_{E,j,l,m}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \varphi_{E,j,l,m}(\mathbf{r}) \\ \chi_{E,j,l,m}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g(r)\Omega_{j,l,m}(\mathbf{n}) \\ if(r)\Omega_{j,l',m}(\mathbf{n}) \end{pmatrix}, \tag{6}$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$, $l' = 2j - l$, $\Omega_{j,l,m}(\mathbf{n})$ – шаровой спинор [10], $g(r)$, $f(r)$ – радиальные функции, связанные соотношением

$$f(r) = \frac{v}{E+\Delta-V}\left(g'(r) + \frac{1+\eta}{r}g(r)\right),\ \eta = \begin{cases} -(l+1), j = l + \frac{1}{2} \\ l, j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \tag{7}$$

После квадрирования уравнение Дирака сводится к

$$g''(r) + \frac{2}{r}g'(r) + g(r)\left[\frac{(E-V)^2 - \Delta^2}{v^2} - \frac{\eta(\eta+1)}{r^2}\right] = 0, \tag{8}$$

решение которого можно выразить через цилиндрические функции [8, 10]. Используя граничные условия [1, 9 – 11] $\sqrt{v}\Psi(r-0) = \sqrt{v_0}\Psi(r+0)$, легко получить уравнения, определяющие уровни размерного квантования

$$\frac{v\beta}{E+\Delta}\left[\frac{J_{|\eta+\frac{1}{2}|-1}(\beta r_0)}{J_{|\eta+\frac{1}{2}|}(\beta r_0)} - \frac{\left|\eta+\frac{1}{2}\right| - \eta - \frac{1}{2}}{\beta r_0}\right] = -\frac{v_0\tilde{\beta}_0}{E+\Delta_0 - V}\frac{K_{\eta-\frac{1}{2}}(\tilde{\beta}_0 r_0)}{K_{\eta+\frac{1}{2}}(\tilde{\beta}_0 r_0)} \tag{9}$$

и приграничные состояния

$$\frac{v\tilde{\beta}}{E+\Delta}\frac{I_{|\eta+\frac{1}{2}|-1}(\tilde{\beta} r_0)}{I_{|\eta+\frac{1}{2}|}(\tilde{\beta} r_0)} = -\frac{v_0\tilde{\beta}_0}{E+\Delta_0 - V}\frac{K_{\eta-\frac{1}{2}}(\tilde{\beta}_0 r_0)}{K_{\eta+\frac{1}{2}}(\tilde{\beta}_0 r_0)}, \tag{10}$$

где

$$\beta = \frac{1}{v}\sqrt{E^2 - \Delta^2},\ \tilde{\beta} = \frac{1}{v}\sqrt{\Delta^2 - E^2},\ \tilde{\beta}_0 = \frac{1}{v_0}\sqrt{\Delta_0^2 - (E-V)^2}. \tag{11}$$

Исследование уравнения (10) показывает, что приграничные состояния существуют только при $\Delta\Delta_0 < 0$, то есть только для инвертированных зон [9]. Отметим также, что в квантовых точках отсутствуют приграничные состояния нового типа [12], что является следствием того, что в квазинульмерном случае отсутствует свободное движение носителей тока, определяющее наличие этих уровней. Поэтому в дальнейшем мы ограничимся рассмотрением только уровней размерного квантования.

Рассмотрим подробнее случай $V = 0$, $v = v_0$. Так как электроны, которым соответствуют положительные решения уравнения (9), и дырки, которым соответствуют отрицательные решения, находятся в одинаковых потенциальных ямах, их спектры должны быть идентичными. В то же время уравнение (9) не симметрично относительно замены E на $-E$. Это противоречие не сложно разрешить. Уровень с заданным j расщеплен ($l = j + 1/2$, $\eta = -j - 1/2$ и $l = j - 1/2$, $\eta = j + 1/2$). Напомним, что l не имеет смысла момента, а только определяет орбитальную четность состояния. Можно показать, что отрицательные корни уравнения (9) при $l = j + 1/2$ равны по модулю положительным корням при $l = j - 1/2$ и наоборот. Таким образом, спектры электронов и дырок различаются лишь порядком заполнения уровней с заданным j, поэтому в дальнейшем мы ограничимся изучением только электронного спектра.

Состояние с $j = 1/2$ расщеплено $[(l = 0, \eta = -1)$ и $(l = 1, \eta = 1)]$ и определяется уравнениями, полученными из (9):

$$\frac{v\beta}{E+\Delta}\left(\mathrm{ctg}(\beta r_0) - \frac{1}{\beta r_0}\right) = -\frac{v_0\tilde{\beta}_0}{E+\Delta_0 - V}\left(1 + \frac{1}{\tilde{\beta}_0 r_0}\right) \tag{12}$$

для $l = 0$, $\eta = -1$ и

$$\frac{v\beta}{E+\Delta}\left(\mathrm{ctg}(\beta r_0) - \frac{1}{\beta r_0}\right)^{-1} = \frac{v_0\tilde{\beta}_0}{E+\Delta_0+V}\left(1+\frac{1}{\tilde{\beta}_0 r_0}\right)^{-1} \tag{13}$$

для $l = 1$, $\eta = 1$.

Состояние с $j = 3/2$ тоже расщепляется на два. Случаю $l = 1$, $\eta = -2$ соответствует уравнение

$$\frac{v\beta}{E+\Delta}\left(\frac{\beta r_0}{1-\beta r_0 \mathrm{ctg}(\beta r_0)} - \frac{3}{\beta r_0}\right) = -\frac{v_0}{r_0(E+\Delta_0-V)}\cdot\frac{r_0^2\tilde{\beta}_0^2+3r_0\beta_0+3}{r_0\tilde{\beta}_0+1}, \tag{14}$$

а случаю $l = 2$, $\eta = 2$ – уравнение

$$\frac{v\beta}{E+\Delta}\left(\frac{\beta r_0}{1-\beta r_0 \mathrm{ctg}(\beta r_0)} - \frac{3}{\beta r_0}\right)^{-1} = \frac{v_0\tilde{\beta}}{(E+\Delta_0-V)}\cdot\left(\frac{r_0^2\tilde{\beta}_0^2+3r_0\beta_0+3}{r_0\tilde{\beta}_0(r_0\tilde{\beta}_0+1)}\right)^{-1}. \tag{15}$$

Как известно, в нерелятивистском случае мелкая и узкая потенциальная яма ($Ua^2 < \pi^2\hbar^2/8m$, U – глубина ямы, a – ее размер, а m – масса электрона) не создает ни одного связанного состояния [13], подобное явление имеет место и в нашей задаче. В уравнениях (12) и (13) связанные состояния отсутствуют при $r_0\sqrt{\Delta_0^2-\Delta^2} < \pi\hbar v$ (для уравнений (14, 15) простого условия найти не удалось). Можно показать, что первым электронным уровнем всегда является s-состояние, то есть уровень $j = 1/2$, $l = 0$.

Т а б л и ц а 1

Значения энергии электронов в квантовой точке с параметрами $\delta = 1/3$, $\rho = 10$

n		1	2	3	4	5	6
$j = 1/2$	$l = 0$	1.042	1.160	1.336	1.551	1.792	2.050
$j = 1/2$	$l = 1$	1.085	1.236	1.436	1.666	1.797	2.182
$j = 3/2$	$l = 1$	1.069	1.206	1.399	1.630	1.885	2.155
$j = 3/2$	$l = 2$	1.146	1.334	1.559	1.805	2.064	2.329

Для удобства численного решения уравнения (12–14) приводились к безразмерному виду введением параметров $\rho = r_0\Delta_0/\hbar v$, $\delta = \Delta/\Delta_0$, $\epsilon = E/\Delta_0$. Результаты численного решения уравнений (12–15) приведены в таблице 1 (в таблице приведены значения величины ϵ, n нумерует уровни с заданными l и j). Мы также оценили энергетический спектр квантовых точек $In_xGa_{1-x}As$ размером $r_0 = 150\,\mathring{A}$ в матрице $GaAs$, которые экспериментально изучались в работе [14]. Используя для оценок значения параметров $2\Delta = 690\,мэВ$ при $x = 0.6$, $2\Delta_0 = 1410\,мэВ$, $v = 0.93v_0 = 1.2 \cdot 10^8\ см/с$ [15], мы получили значения, лишь качественно (правильное чередование энергетических уровней) совпадающие с результатами эксперимента.

Причины несовпадения в основном состоят в том, что экспериментальное значение x, которое определяет энергетический спектр, известно с малой точностью. Это связано с диффузией атомов Ga из матрицы $GaAs$ в квантовые точки [16], в результате которой геометрия квантовой точки и ее квантовая яма имеют существенно более сглаженную форму, чем рассматриваемая нами.

В работах [16, 18] изучались сходные квазинульмерные системы – сверхатомы. Сверхатом с зарядом Z – это включение из более широкозонного полупроводника (содержащее Z донорных атомов) в матрице узкозонного полупроводника. Как показано в этих работах, разрыв первого рода центрально-симметричного потенциала в нерелятивистском уравнении Шредингера приводит к тому, что в достаточно узкой потенциальной яме уровень $2s$ может оказаться выше уровня $2p$, а уровни в сверхатоме вырождены по направлению спина. В работе [19] получено, что минимальную энергию могут иметь также и f-состояния. Отметим, что в нашем случае это вырождение снимается, а "пересечение" термов сохраняется. По таблице 1 видно, что следующим после основного состояния является уровень $j = 3/2$, $l = 1$, то есть p-состояние.

Настоящая работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 00-02-17529) и стипендии им. Л. Д. Ландау, предоставленной KFA Forschungszentrum Julich GmsH.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Печеник Л. Е., Силин А. П. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 9-10, 63 (1995).

[2] Gourly P. L. Nature, **371**, 571 (1994).

[3] Nortzel R., Temmio J., Tamamura T., et al. Europhys. News, **27**, 148 (1996).

[4] Klein D. L., Roth R., Lim A. K., et al. Nature, **389**, 699 (1998).

[5] Вандышев Ю. В., Днепровский В. С., Екимов А. И., и др. Письма в ЖЭТФ, **46**, 10 (1987).

[6] Heller W., Bokelmann U., Abstreiter G. Phys. Rev., **857**, 6270 (1998).

[7] Lee H., Lowe-Webb R., Yang W., et al. Appl. Phys. Lett., **72**, 812 (1998).

[8] Волков Б. А., Идлис Б. Г., Усманов М. Ш. УФН, **165**, 99 (1995).

[9] Идлис Б. Г., Усманов М. Ш. ФТП, **28**, 767 (1994).

[10] Ахиезер А. И., Берестецкий В. Б. Квантовая электродинамика. М., Наука, 1969.

[11] Силин А. П., Шубенков С. В. ФТТ, **40**, 1345 (1998).

[12] Kolesnikov A. V., Lipperheide R., Silin A. P., Wille O. Europhys. Lett., **43**, 331 (1998).

[13] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М., Наука, 1989.

[14] Bayer M., Stern O., Hawrylak P., Forchel A. Nature, **923**, 405 (2000).

[15] Sai-Halasz G. A., Chang L. L., Velter J.-M., et al. Sol. St. Commun., **27**, 935 (1978).

[16] Garcia J. M., Mederios-Ribeiro G., Schmidt K., et al. Appl. Phys., **71**, 2014 (1997).

[17] Андрюшин Е. А., Быков А. А. УФН, **154**, 1 (1986).

[18] Андрюшин Е. А., Силин А. П. ФТТ, **33**, 1 (1991).

[19] Loshita T., Ohnishi S., Oshiyama A. Phys. Rev. Lett., **57**, 2560 (1986).

Поступила в редакцию 27 декабря 2000 г.