

УДК 539.1

ПРИМЕСИ В УЗКОЩЕЛЕВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

Л. Е. Печеник, А. П. Силян

Исследовано влияние конечности энергетической щели на энергию связи примесного атома и уровни размерного квантования в квантовой точке. Конечность энергетической щели приводит к достаточно сильному понижению уровней размерного квантования. Ее влияние на энергию связи менее значительно, но более разнообразно. Результаты численных расчетов представлены на графиках.

Энергетический спектр примесных (для определенности донорных) электронов в узкощелевых полупроводниках описывается уравнением Дирака, которое аналогично уравнению, использованному в работе [1] для описания глубоких уровней. В этой работе мы рассматриваем упрощенную (двухзонную) дираковскую модель полупроводника с равными и изотропными массами электронов и дырок [2]. Более точная трехзонная модель полупроводника, точнее описывающая полупроводниковую структуру полупроводников группы алмаза и цинковой обманки, не может, по-видимому, дать принципиально новых результатов, однако существенно усложнит расчеты.

Достижения полупроводниковой технологии привели к тому, что появилась возможность создания разнообразных полупроводниковых структур с нанометровыми размерами (наноструктур), в которых движение носителей тока сильно анизотропно (квантовые ямы, сверхрешетки, квантовые нити и т.п.) [3]. Довольно интересным на наш взгляд объектом являются квантовые точки, представляющие собой нанометровые включения одного полупроводника (с меньшей энергетической щелью) в другой. Благодаря трехмерному ограничению квантовые точки являются практически нульмерными и обладают интересными оптическими свойствами [4 – 6].

Энергия носителей тока в квантовых точках слабо зависит от их формы (шар, куб, цилиндр и т.п.), поэтому мы будем для простоты считать, что квантовая точка имеет форму шара с радиусом R . Энергия связи донорных электронов в наноструктурах

довольно сильно зависит от положения примесного атома относительно границы, если эффективный радиус доноров порядка размеров структуры (см., напр., [7]), и максимальна, если примесный атом находится в центре структуры. В настоящей работе мы не будем учитывать эту зависимость и рассматриваем примесный атом с зарядом Ze , расположенный в центре шара. Подобная задача, но для квантовых точек, составленных из широкозонных полупроводников, была рассмотрена в работе [8]. Ввиду сферической симметрии уравнения Дирака расчет энергии связи донора в узкощелевой квантовой точке сводится к решению системы уравнений [9]:

$$\begin{cases} \frac{d\psi_1}{dr} - \frac{k}{r}\psi_1 + \frac{1}{\hbar s}(E - \Delta(r) - V(r))\psi_2 = 0 \\ \frac{d\psi_2}{dr} + \frac{k}{r}\psi_2 - \frac{1}{\hbar s}(E + \Delta(r) - V(r))\psi_1 = 0. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь полуширина запрещенной зоны $\Delta(r) = \Delta_1$ при $r < R$ и $\Delta(r) = \Delta_2$, при $r > R$, причем для квантовой точки $\Delta_1/\Delta_2 = \delta < 1$. Поле примесного центра описывается потенциалом $V(r) = -Ze^2/\epsilon r$, где ϵ – статическое значение диэлектрической проницаемости, которое мы считаем одинаковым в обоих полупроводниках. Величина $\kappa = l(l+1) - j(j+1) - 1/4$ определяет зависимость энергии E от орбитального момента l и полного момента j . Эффективная масса носителей в каждом из полупроводников связана посредством кейновского матричного элемента s ("скорости света") с величиной энергетической щели $2\Delta(r)$: $\Delta_{1,2} = m_{1,2}s^2$. Мы отсчитываем энергию от середины энергетической щели, положение которой одинаково в обоих полупроводниках.

Решение системы (1) можно записать в аналитическом виде. При $r < R$ и $r > R$ функции ψ_1 и ψ_2 выражаются через вырожденные гипергеометрические функции первого рода $F(a, c, \rho)$ (для $r < R$) и второго рода $G(a, c, \rho)$ (для $r > R$) (см., напр., [10]), которые зависят от энергии E как от параметра. Собственные значения системы (1) можно получить из условия непрерывности ψ_1 и ψ_2 :

$$\frac{\psi_1}{\psi_2} \Big|_{r=R-0} = \frac{\psi_1}{\psi_2} \Big|_{r=R+0}.$$

При интересующих нас размерах квантовых точек, когда $R \leq a_x$ (a_x – боровский радиус объемного донора в первом полупроводнике), $E > \Delta_1$, так как положительный вклад в энергию размерного квантования превосходит отрицательный вклад кулоновского взаимодействия. Мы ограничимся в дальнейшем случае $E < \Delta_2$. При этом уравнение, определяющее уровни энергии, принимает вид:

$$\sqrt{\frac{E/\Delta_1 - 1}{E/\Delta_1 + 1} \frac{\text{Im}\Phi}{\text{Re}\Phi}} = \Lambda, \quad (2)$$

где

$$\Lambda = -\frac{\sqrt{1 - \frac{E}{\Delta_2}} G(a_2, c, \rho_2) + \frac{(a_2 - c + 1)a_2}{\gamma - \kappa - a_2} G(a_2 + 1, c, \rho_2)}{\sqrt{1 + \frac{E}{\Delta_2}} - G(a_2, c, \rho_2) + \frac{(a_2 - c + 1)a_2}{\gamma - \kappa - a_2} G(a_2 + 1, c, \rho_2)},$$

$$\Phi = a_1 e^{i\theta - ipR} F(a_1 + 1, c, 2\frac{ipR}{\hbar s}), \quad p = \sqrt{E^2 - \Delta_1^2}, \quad \gamma = \sqrt{\kappa^2 - \alpha^2},$$

$$\alpha = \frac{Ze^2}{\hbar s c}, \quad \xi = \frac{\alpha E}{p}, \quad a_2 = \gamma - \frac{\alpha E}{\lambda}, \quad c = 2\gamma + 1, \quad \lambda = \sqrt{\Delta_2^2 - E^2},$$

$$a_1 = \gamma + i\xi, \quad \rho_2 = 2\frac{\lambda}{\hbar s} R, \quad e^{2i\theta} = \frac{\gamma - i\xi}{-\kappa - i\frac{\Delta_1 \xi}{E}}.$$

Величина α ("постоянная тонкой структуры") характеризует влияние конечности энергетической щели на энергию связи донора и в некоторых полупроводниках может достигать значений 0,1 - 0,2. В дальнейшем для простоты мы ограничимся случаем $\delta = 0$, то есть наноструктурой, в которой узкощелевой полупроводник граничит с диэлектриком (вакуумом), тогда $\Lambda = 1$. Для определения энергии связи донора определим вначале вклад в энергию размерного квантования. В случае отсутствия примесного центра (т.е. при $\alpha = 0$) уравнение (2) переходит в

$$\mu \frac{\kappa}{|\kappa|} \sqrt{\lambda} J_{|\kappa - \frac{1}{2}|}(2\sqrt{\lambda(2 + \lambda\mu^2)}) + \sqrt{1 + \mu^2\lambda} J_{|\kappa + \frac{1}{2}|}(2\sqrt{\lambda(2 + \lambda\mu^2)}) = 0, \quad (3)$$

где $\lambda = (E - \Delta_1)/\tilde{E}$, $\mu = \sqrt{\tilde{E}/\Delta_1}$, $\tilde{E} = \frac{\hbar^2}{mR^2}$.

Для широкозонных полупроводников, т.е. при $\mu = 0$ уровни размерного квантования задаются обычным уравнением [9]:

$$J_{|\kappa + \frac{1}{2}|}(\sqrt{2\lambda}) = 0.$$

Учет конечности ширины энергетической щели приводит к нарушению квадратичной зависимости энергии от R^{-1} , характерной для случая $\mu = 0$. Как видно из уравнения (3), величина $v = (\lambda_{\mu=0} - \lambda_\mu)/\lambda_{\mu=0}$, характеризующая относительное понижение уровня размерного квантования при учете конечности энергетической щели, зависит только от μ . Результаты численного расчета представлены на рис. 1.

При увеличении параметра μ уровни размерного квантования понижаются. Относительное влияние изменения величины энергетической щели тем больше, чем больше

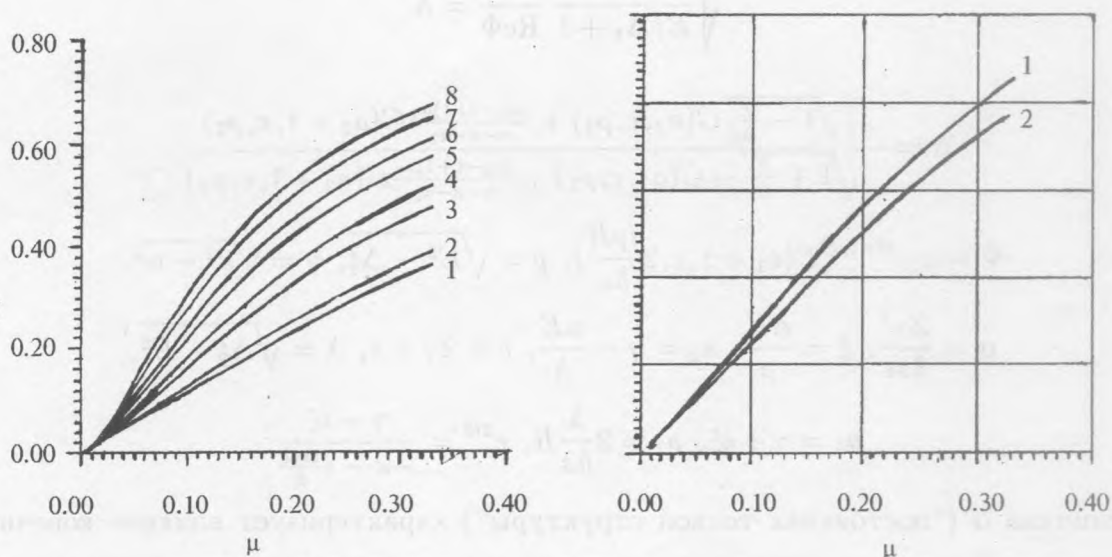


Рис. 1. Зависимость энергии уровней размерного квантования от величины энергетической щели μ . 1 - уровень с $\kappa = -1, n = 1$ (n - номер уровня в порядке возрастания энергии при фиксированном κ), 2 - $\kappa = 1, n = 1$, 3 - $\kappa = -1, n = 2$, 4 - $\kappa = 1, n = 2$, 5 - $\kappa = -1, n = 3$, 6 - $\kappa = 1, n = 3$, 7 - $\kappa = -1, n = 4$, 8 - $\kappa = 1, n = 4$.

Рис. 2. Расщепление первого возбужденного уровня ΔV в зависимости от ширины энергетической щели μ . 1 - $\kappa = 1, n = 1$, 2 - $\kappa = -2, n = 1$.

энергия размерного квантования при бесконечно большой щели. Даже для основного состояния при экспериментально доступных значениях μ ($\mu = 0,4$) влияние конечности энергетической щели довольно значительно и составляет $0,35\lambda_{\mu=0}$. Это влияние приводит также к расщеплению уровней с одинаковой величиной l и вырожденных при $\mu = 0$ по κ . Для первого возбужденного уровня этот эффект представлен на рис. 2. Величина расщепления пропорциональна $\mu\lambda_{\mu=0}$. При наличии примесного центра уравнение (2), определяющее уровни энергии при $\delta = 0$, имеет вид:

$$\sqrt{2 + \lambda\mu^2}\text{Re}\Phi - \mu\sqrt{\lambda}\text{Im}\Phi = 0,$$

где

$$\Phi = \sqrt{\left(\gamma + i\frac{Z\alpha(1 + \lambda\mu^2)}{\mu\sqrt{\lambda(2 + \lambda\mu^2)}}\right) \left(-\kappa + i\frac{Z\alpha}{\mu\sqrt{\lambda(2 + \lambda\mu^2)}}\right) e^{-i\sqrt{\lambda(2 + \lambda\mu^2)}x}}$$

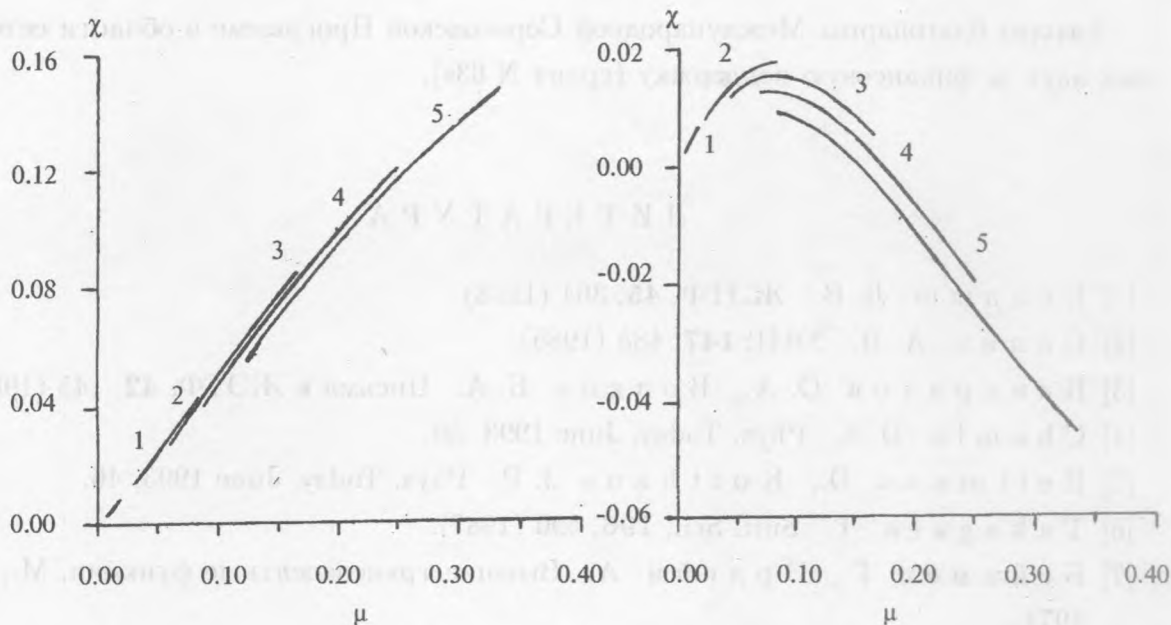


Рис. 3. Зависимость энергии связи основного состояния χ ($\kappa = -1, n = 1$) от величины энергетической щели μ . $\chi = (\bar{\lambda}_\infty - \bar{\lambda})/\bar{\lambda}_\infty$, где $\bar{\lambda} = \lambda_{\alpha=0} - \lambda_\alpha$, $\bar{\lambda}_\infty$ - значение $\bar{\lambda}$ в пределе бесконечной энергетической щели. $\alpha = 0,01$ (1); $\alpha = 0,05$ (2); $\alpha = 0,1$ (3); $\alpha = 0,15$ (4); $\alpha = 0,2$ (5).

Рис. 4. Зависимость энергии связи χ уровня с $\kappa = 1, n = 1$ от величины энергетической щели μ . $\alpha = 0,01$ (1); $\alpha = 0,05$ (2); $\alpha = 0,1$ (3); $\alpha = 0,15$ (4); $\alpha = 0,2$ (5).

$$\times F \left(\gamma + 1 + i \frac{Z\alpha(1 + \lambda\mu^2)}{\mu\sqrt{\lambda(2 + \lambda\mu^2)}}, 2\gamma + 1, 2i\sqrt{\lambda(2 + \lambda\mu^2)} \right).$$

Результаты расчетов энергии связи для основного состояния представлены на рис. 3. Энергия связи уменьшается при увеличении α , т.е. при уменьшении ширины энергетической щели. Для возбужденных уровней конечность энергетической щели приводит к более разнообразным зависимостям от параметра α . Так, для первого возбужденного уровня при $\kappa = 1$ энергия связи при достаточно больших α повышается, как это видно из рис. 4. Однако необходимо отметить, что изменение энергии связи при учете конечности энергетической щели для всех уровней менее значительно, чем изменение энергии уровней размерного квантования (для основного состояния примерно в 2,5 раза).

Настоящая работа частично поддержана грантами Российского фонда фундаментальных исследований N 93-02-14700, Международного научного фонда N N9Z000.

Авторы благодарны Международной Соросовской Программе в области естественных наук за финансовую поддержку (грант N 63s).

Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] Келдыш Л. В. ЖЭТФ, **45**, 364 (1963).
- [2] Силин А. П. УФН, **147**, 485 (1985).
- [3] Панкратов О. А., Волков Б. А. Письма в ЖЭТФ, **42**, 145 (1985).
- [4] Chemla D. S. Phys. Today, June 1993, 56.
- [5] Heitmann D., Kothaus J. P. Phys. Today, June 1993, 46.
- [6] Такагага Т. Surf. Sci., **196**, 590 (1987).
- [7] Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции, М., Наука, 1974.
- [8] Rogras - Montenegro N., Perez - Merchansano S. T. Phys. Rev. B. **46**, 9780 (1992).
- [9] Ахиезер А. И., Берестецкий В. Б. Квантовая электродинамика, М., Наука, 1969.
- [10] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика, М., Наука, 1989.

Поступила в редакцию 9 июня 1995 г.

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla^2 \psi \right) = \frac{1}{2} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla^2 \psi$$