

©1995 г.

ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ D^- -ЦЕНТРА В КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ

М.А.Одноблюдов, А.А.Пазомов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021, Санкт-Петербург, Россия
(Получена 8 декабря 1994 г. Принята к печати 16 декабря 1994 г.)

В приближении потенциалов нулевого радиуса рассчитана зависимость энергии связи D^- -центра от его положения внутри квантовой точки. Зависимость оказалась сильной и немонотонной.

В последнее время появился ряд теоретических работ, посвященных вычислению энергии отрицательно зараженного состояния донора (D^- -состояния) в квантово-размерных структурах, в том числе в квантовых точках [1,2]. Существенным недостатком имеющихся работ является тот факт, что вычисления проводятся для дефектов, расположенных в середине квантовой точки. Ясно, однако, что энергия D^- -центра в квантовой точке должна существенно зависеть от его положения внутри квантовой точки, поскольку вблизи границы раздела волновые функции локализованного состояния существенно искажаются [3]. В связи с этим представляет интерес вычисление энергии D^- -состояния в зависимости от его положения.

В настоящей работе энергия D^- -состояния в квантовой точке рассчитывается в рамках приближения потенциалов нулевого радиуса [4]. В этом приближении короткодействующий потенциал нейтрального донора, расположенного внутри квантовой точки, заменяется на граничное условие

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}_0) = C \left(\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_0|} - \kappa \right), \quad |\mathbf{r} - \mathbf{R}_0| \rightarrow 0, \quad (1)$$

где \mathbf{R}_0 определяет положение донорного центра, а параметр κ связан с энергией ионизации нейтрального донора ε_0 соотношением

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m^*\varepsilon_0}}{\hbar},$$

C — нормировочная константа. Такое приближение можно использовать в случае, когда размер квантовой точки a значительно превышает боровский радиус a_B .

Волновая функция D^- -состояния с энергией ε , отсчитанной от дна квантовой точки, вне области действия потенциала нейтрального донора имеет вид

$$\Psi(\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{R}_0) = AG(\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{R}_0), \quad (2)$$

где G — функция Грина электронного состояния в квантовой точке с источником, расположенным в точке \mathbf{R}_0 , и удовлетворяющая граничным условиям на границе квантовой точки, A — нормировочная константа. Мы будем считать потенциальный барьер на границе квантовой точки сферически-симметричным и бесконечно высоким. Последнее приближение оправдано, так как характерные энергии связи D^- -состояний обычно во много раз меньше скачка потенциала на границе квантовой точки.

В соответствии с общими правилами [5] функция Грина состояния в квантовой точке может быть представлена в виде

$$G(\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{R}_0) = G^{(0)}(\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{R}_0) - G_{\text{reg}}(\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{R}_0), \quad (3)$$

где

$$G^{(0)}(\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{R}_0) = \frac{m^* e^{-\alpha|\mathbf{r}-\mathbf{R}_0|}}{2\pi\hbar |\mathbf{r}-\mathbf{R}_0|}, \quad \alpha = \frac{\sqrt{2m^*\varepsilon}}{\hbar}, \quad (4)$$

а G_{reg} — регулярное решение уравнения Шредингера, удовлетворяющее следующему граничному условию на стенках квантовой точки:

$$G_{\text{reg}}(\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{R}_0)|_{r=a} = G^{(0)}(\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{R}_0)|_{r=a}. \quad (5)$$

Используя разложение [6]

$$G^{(0)}(\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{R}_0) = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{\sqrt{r_>r_<}} I_{l+1/2}(\alpha r_<) K_{l+1/2}(\alpha r_>) P_l(\cos\theta), \quad (6)$$

где $r_< = r$, $r_> = R_0$ при $r < R_0$ и $r_> = r$, $r_< = R_0$ при $r > R_0$. Здесь для простоты ось z направлена вдоль R_0 ; I_α , K_α — модифицированные функции Бесселя и Макдональда соответственно, $P_l(\cos\theta)$ — полином Лежандра. Функцию G_{reg} нетрудно построить в виде линейной комбинации частных решений уравнения Шредингера,

$$G_{\text{reg}} = \sum_{l=0}^{\infty} A_l(R_0, a) \frac{I_{l+1/2}(\alpha r)}{\sqrt{r}} P_l(\cos\theta). \quad (7)$$

Определяя коэффициенты A_l из граничного условия (5), имеем для функции Грина G при $r > R_0$

$$G(r, R_0) = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{\sqrt{rR_0}} P_l(\cos\theta) \left[I_{l+1/2}(\alpha R_0) K_{l+1/2}(\alpha r) - \frac{I_{l+1/2}(\alpha R_0) K_{l+1/2}(\alpha a)}{I_{l+1/2}(\alpha a)} I_{l+1/2}(\alpha r) \right]. \quad (8)$$

Подставляя (8) в граничное условие (1) и используя правила сумм для I_α , K_α [6], получаем уравнение для энергии связи электрона на D^- -центре в квантовой точке

$$\kappa = \frac{\pi}{2R_0} \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^l (2l+1) \frac{I_{l+1/2}^2(\alpha R_0) I_{-l-1/2}(\alpha a)}{I_{l+1/2}(\alpha a)}. \quad (9)$$

Заметим, что уравнение справедливо лишь для случая вещественных α , т.е. для энергий уровней, лежащих ниже дна квантовой точки. Для уровней, лежащих выше дна квантовой точки, имеет место уравнение

$$\kappa = \frac{\pi}{2R_0} \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^l (2l+1) \frac{J_{l+1/2}^2(\beta R_0) J_{-l-1/2}(\beta a)}{J_{l+1/2}(\beta a)}, \quad (10)$$

$$\beta = \frac{\sqrt{2m^* \epsilon'}}{\hbar},$$

где ϵ' есть абсолютная величина разности энергии уровня и энергии дна квантовой точки, $J_\nu(x)$ — функция Бесселя. Сумма, входящая в уравнения, легко вычисляется на ЭВМ с использованием рекуррентных соотношений для функций Бесселя [6].

Для D^- -центров, находящихся в центре квантовой точки, уравнения (9), (10) упрощаются:

$$\alpha \operatorname{cth}(\alpha a) = \kappa \quad \text{при} \quad \kappa a > 1, \quad (11a)$$

$$\beta \operatorname{ctg}(\beta a) = \kappa \quad \text{при} \quad \kappa a < 1. \quad (11b)$$

Обсудим основные качественные особенности уравнений (9)–(11). Сумма (10) имеет полюса, соответствующие корням уравнений

$$J_{l+1/2}(\beta a) = 0, \quad (12)$$

определяющих энергетический спектр электрона в сферической потенциальной яме [7]. Это означает, что каждый уровень размерного квантования в квантовой точке испытывает возмущение, вносимое короткодействующим потенциалом. Исключения составляют лишь дефекты, положение которых соответствует узлам радиальной волновой функции, для которых $J_{l+1/2}(\beta R_0) = 0$. В частности, при $R_0 = 0$ невозмущенным оказывается состояние с $l = 0$. В общем случае от $(2l+1)$ -кратно вырожденного состояния (nlm) (n — радиальное квантовое число, m — проекция орбитального момента на направление R_0) отщепляется состояние с $m = 0$. Состояния с $m \neq 0$ не возмущаются короткодействующим потенциалом, и их энергии остаются такими же, как и в отсутствие D^- -центра. Таким образом, при наличии короткодействующего центра внутри квантовой точки энергии состояний (ns) и $(nl0)$ становятся энергиями основного и возбужденных состояний дефекта (рис. 1). Основное состояние D^- -центра «происходит» из $1s$ -состояния квантовой точки, при этом энергетический уровень,

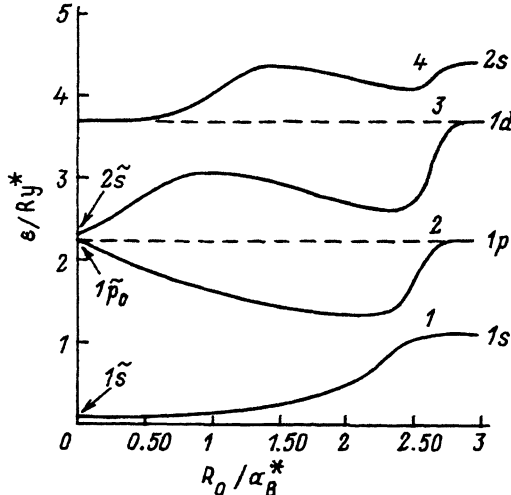


Рис. 1. Зависимость энергетического спектра квантовой точки от положения дефекта R_0 . Сплошные линии — энергетические уровни в квантовой точке с дефектом, штриховые — невозмущенные уровни с $m \neq 0$, $a = 3a_B$.

отвечающий $1s$ -состоянию в квантовой точке без дефекта, в энергетическом спектре отсутствует. В случае, когда энергия связи D^- -центра в объемном материале меньше энергии размерного квантования (т.е. $\kappa a < 1$), что имеет место практически для всех представляющих интерес квантовых точек, ближайшим по энергии является состояние $1p_0$ (или $1p$ — для дефекта в центре квантовой точки), так что энергия ионизации D^- -центра равна

$$\varepsilon(D^-) = \varepsilon(1\tilde{s}) - \varepsilon(1\tilde{p}_0),$$

где $\varepsilon(1\tilde{s})$ и $\varepsilon(1\tilde{p}_0)$ — энергии состояний, «происшедших» от $1s$ - и $1p_0$ -состояний невозмущенной квантовой точки (см. рис. 1). Необходимо отметить следующее. В [1,2] предполагалось, что электрон в результате ионизации переходит на невозмущенный $1s$ -уровень квантовой точки. Такое пренебрежение возмущающим действием потенциала нейтрального донора приводит к значению энергии связи, заниженному на величину, приблизительно равную разности энергий $1s$ - и $1p$ -уровней квантовой точки.

На рис. 2 приведена зависимость энергии D^- -состояния, связанного с примесью мышьяка в германии, от положения донорных центров внутри квантовой точки для квантовой точки с $a = 3a_B$. В качестве эффективной массы при вычислении параметра α в (8), (9) мы использовали массу «плотности состояний» $m_{cd} = (m_{\parallel}m_{\perp}^2)^{1/3}$. Видно, что зависимость энергии связи основного состояния D^- -центра от его положения существенно нелинейна.

В заключение обсудим точность использованного нами приближения потенциалов нулевого радиуса. Как уже отмечалось, это приближение справедливо в случае, когда размер квантовой точки превышает боровский радиус. Энергия связи D^- -центра в середине квантовой точки в работах [1,2] рассчитывалась по формуле $\varepsilon_i = \varepsilon(D^-) - [\varepsilon(D^0) + \varepsilon(1s)]$, где $\varepsilon(D^-)$ — абсолютная величина энергии двухэлектронного D^- -состояния, $\varepsilon(D^0)$ — абсолютная величина энергии электрона,

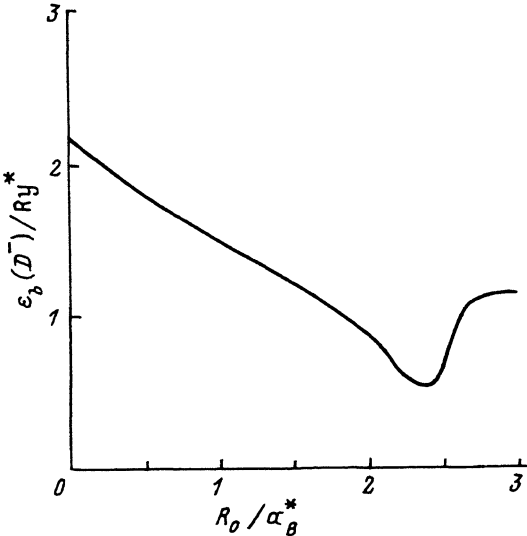


Рис. 2. Зависимость энергии связи D^- -состояния, $\epsilon_b(D^-)$, от положения дефекта внутри квантовой точки R_0 для примеси As в Ge в квантовой точке с $a = 3a_B$. Энергия D^- -состояния в объеме: $\epsilon = 0.063 Ry^*$.

связанного на нейтральном доноре, $\epsilon(1s)$ — энергия $1s$ -уровня размерного квантования в отсутствие D^- -центра. Возмущение, вносимое D^- -центром в спектр квантовой точки, можно приближенно учесть, заменив величину $\tilde{\epsilon}(1s)$ на $\epsilon(1p)$, т.е. на энергию $1p$ -уровня. В этом случае расхождение между исправленными таким образом результатами [1,2] и вычисленным нами значением составляет 25% уже при $a = 3a_B$. Мы использовали в качестве энергии связи D^- -центра в объеме результат работы [8] для отрицательного водородоподобного иона, $\hbar^2 \kappa^2 / 2m = 0.055 Ry^*$, где Ry^* — эффективный ридберг для данного материала.

Работа поддержана грантом № R60000 Международного научного фонда.

Список литературы

- [1] J.-L. Zhu, J.-H. Zhao, W.-H. Duan, B.-L. Gu. Phys. Rev. B, **46**, 7546 (1992).
- [2] J.-L. Zhu, J.-H. Zhao, J.-J. Xiong. Phys. Rev. B, **50**, 1832 (1994).
- [3] А.А. Пахомов, И.Н. Ясиевич. ФТП, **27**, 482 (1993).
- [4] Ю.Н. Демков, Н.И. Островский. *Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике* (Л., 1975).
- [5] Г. Корн, Т. Корн. *Справочник по математике* (М., 1978).
- [6] *Справочник по специальным функциям*, под ред. М. Абрамовица, И. Стигана (М., 1979).
- [7] Л.Д. Ландау, Е.М. Лившиц. *Квантовая механика* (М., 1989).
- [8] Г. Бете, Э. Солпитер. *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами* (М., 1966).

Редактор Л.В. Шаронова

The D^- -center binding energy in a quantum dot

M.A. Odnoblyudov, A.A. Pakhomov

A.F. Ioffe Physicotechnical Institute, Russian Academy of Sciences, 194021 St. Petersburg, Russia

The D^- -center binding energy dependence on the position of the center in a quantum dot is calculated within the zero-range potential approximation. A strong and non-monotonous dependence of the binding energy on D^- -center position is obtained.
