МОДЕЛЬ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ СВЕРХАТОМА

Е. А. Андрюшин, А. П. Силин

Проведена оценка влияния размеров и формы сверхатома на его электронные свойства. Для расчетов использованы потенциал Кратцера и потенциал с твердым кором.

Идея сверхатома — квазиатомной полупроводниковой гетероструктуры — была предложена в [1] в 1986 г. Включение из более широкозонного полупроводника в матрице узкозонного может рассматриваться как аналог ядра обычного атома. Если, скажем, полупроводниковое ядро легировано — содержит Z донорных атомов, — то донорные электроны «стекают» в матрицу, а ядро получает положительный заряд. При разумных размерах радиуса ядра $R_c \sim 10^2$ Å величина Z может достигать нескольких десятков и даже превосходить порядковые номера всех известных элементов таблицы Менделеева. При этом донорные электроны образуют с ядром связанные состояния, которые по энергии расположены под дном зоны проводимости матрицы.

Создание композитных материалов и использование их механических, электрических, термических свойств — доминирующая тенденция современной технологии, и нам представляется, что изготовление и физическое исследование сверхатома достаточно интересно. Видимо, возможно создание как отдельного сверхатома, так и упорядоченной (одно-, дву- или трехмерной) системы сверхатомов. Электронные состояния отдельных или разделенных достаточно большим расстоянием сверхатомов до некоторой степени аналогичны экситонно-примесным комплексам [2], а также электронным состояниям внутри так называемых квантовых «точек» или «дисков» [3–5]. С такими состояниями, видимо, также можно будет связать оптические нелинейности различного вида [7]. Упорядочение же сверхатомов позволит получать особые производящие каналы в полупроводниковой матрице, а также создавать примесную зону нового типа.

Следует заметить, что сверхатом можно создавать самыми разными методами, например прямым выращиванием методами молекулярно-лучевой эпитаксии и пр.; получать сверхатомы в твердых растворах как зародыши одной фазы в другой; наконец, существуют определенные классы веществ, в которых естественным образом возникают пустоты. В качестве матрицы, которую можно заполнять различными веществами, могут использоваться цеолиты [8]. Полости в цеолите типа X, куда вводился под давлением из расплава теллур, образуют правильную решетку типа алмаза с постоянной 24 Å. Диаметр одной полости составляет приблизительно 12 Å. Такие полости сообщаются между собой через окна диаметром 8 Å. Концентрация теллура составляет около 23 атомов на полость. Эти кластерные кристаллы обладают довольно высокой проводимостью (10^{-1} Ом$^{-1}\cdot$см$^{-1}$ при 300 К), по величине близкой к объемному теллуру, и могут иметь отрицательную дифференциальную проводимость S- и N-типов [9].

В настоящей работе мы оцениваем зависимость расположения энергетических уровней сверхатома от различных его параметров. Конкретный расчет сверхатома с ядром $Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ и матрицей GaAs был проведен в [10].

Состояние сверхатома описывается нерелятивистским уравнением Шредингера

$$\Psi''(r)+\frac{2}{r}\Psi'(r)+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(r)-l(l+1)/r^2]\Psi(r)=0 \qquad (1)$$

со сферически-симметричным потенциалом $V(r)$. Здесь $\Psi(r)$ — радиальная часть волновой функции; $l=0, 1, 2, \ldots$ — орбитальное квантовое число; r — расстояние от центра ядра; m — эффективная масса частицы в матрице. В [10] потенциал $V(r)$ рассчитывался численно самосогласованным образом с учетом обменно-корреляционного вклада по теории функционала локальной плотности. Наиболее эффектный результат расчета — изменение последовательности заполнения уровней по сравнению с расчетами многоэлектронных атомов (см., например, [11]). Оказывается, что уровни с большими l и малыми n_r ($n_r=0, 1, 2, \ldots$ — радиальное квантовое число) лежат по энергии ниже, чем уровни с малыми l и большими n_r. Конкретные соотношения положения уровней зависит от R_c и Z. В работе [12] показано, что этот результат обусловлен главной особенностью потенциала — скачком при $r=R_c$, и приведены различные теоремы, регулирующие «движение» уровней с различными квантовыми числами.

В данной работе мы хотели бы заметить, что основные особенности расположения уровней могут быть переданы в простой аналитической модели, также основанной на уравнении (1). Заменим самосогласованный потенциал $V(r)$ [10] кулоновским потенциалом с дополнительным центробежным потенциалом, т. е. возьмем $V(r)$ в виде

$$V(r)=-Ze^2/\varepsilon r+R_c/2r^2. \qquad (2)$$

Если ввести стандартные кулоновские единицы энергии и расстояния

$$E_{\text{кул}}=mZ^2e^4/\varepsilon^2\hbar^2, \quad a_{\text{кул}}=\varepsilon\hbar^2/Ze^2m \qquad (3)$$

(ε — диэлектрическая проницаемость, которую мы считаем единой во всей системе), то в уравнение войдет безразмерный потенциал

$$\tilde{V}(r)=-1/r+\delta/2r^2, \qquad (4)$$

причем безразмерная величина $\delta=R_c/a_{\text{кул}}$ будет соответствовать радиусу ядра. Уравнение Шредингера с потенциалом Кратцера (2) решается аналитически [13]. Уровни энергии

$$E=(-1/2(n_r+\lambda)^2)E_{\text{кул}}, \qquad (5)$$

$$\lambda=1/2+\sqrt{1/4+\delta+l(l+1)}. \qquad (6)$$

Чем больше δ, тем слабее на ее фоне сказывается увеличение l. Можно сказать, что «пропадают» нижние уровни кулоновского потенциала, а верхние остаются на своих местах. При любом δ

$$E(n_r=1,\ l=0)>E(n_r=0,\ l=1), \qquad (7)$$

при $\delta>6$

$$E(n_r=1,\ l=0)>E(n_r=0,\ l=2), \qquad (8)$$

при $\delta>30$

$$E(n_r=1,\ l=0)>E(n_r=0,\ l=3). \qquad (9)$$

Следует заметить, что единица расстояния $a_{\text{кул}}$ в зависимости от значений m, ε и Z может меняться в очень широких пределах. В частности, в матрицах из узкозонных полупроводников технологически достижимы сверхатомы с малыми δ. Наоборот, при $Z\gg m_0\varepsilon/m$, где m_0 — масса свободного электрона, $a_{\text{кул}}$ может быть меньше межатомного расстояния. Тогда мы получаем ситуацию с $\delta\gg 1$.

Безусловно, выражение (5) не может использоваться при непосредственном сравнении с экспериментальными данными, для этого нужен численный расчет. Мы рассматриваем лишь качественную зависимость энергии от Z, δ и (см. ниже) от формы ядра. Можно показать, однако, что и для более реалистического потенциала с твердым кором

$$\tilde{V}(r)=\begin{cases} 1/2, & r\geqslant\delta, \\ 0, & r<\delta \end{cases} \tag{10}$$

получаются близкие результаты, а именно для энергии основного состояния вариационным методом с пробной функцией

$$\Psi(r)=\exp[-(r-\delta)/a]-\exp[-(r-\delta)/a\xi], \tag{11}$$

где a, ξ — вариационные параметры, получены значения (см. таблицу). Отметим, что возбужденные состояния в потенциалах (10) и (4) должны совпадать с лучшей точностью, так как на них будет слабее сказываться влияние ядра.

σ	Энергия основного состояния в потенциале (10)	E ($n_r=0$, $l=0$) согласно (5)
0	—0.5	—0.5
0.1	—0.377	—0.419
0.5	—0.242	—0.267
1	—0.180	—0.191
2	—0.125	—0.125
3	—0.098	—0.094
5	—0.070	—0.064
10	—0.043	—0.037
20	—0.025	—0.020

В системе сверхатомов их спектроскопическое обнаружение может быть затруднено из-за разброса параметров сверхатомов и соответственно различия в положении уровней. В предложенной модели легко получить критерий «наложения» уровней различных сверхатомов. Наложение уровней с $n_r=0$ и $n_r=1$ происходит при изменении $\Delta\delta\sim 1$, т. е.

$$\Delta R_c\sim a_{\text{кул}},$$

или при изменении заряда ядра

$$\Delta Z\sim 0.25Z. \tag{12}$$

Изменение формы ядра в рамках данной модели естественно учитывать как появление асимметрии добавочного центробежного потенциала. Пусть, например, ядро приобретает форму вытянутого эллипсоида вращения без изменения объема. Это соответствует замене в потенциале (2)

$$R_c/2r^2\rightarrow R_c\gamma^{1/3}/2(x^2+y^2+\gamma z^2). \tag{13}$$

Вариационным методом можно исследовать зависимость энергии основного состояния от γ и δ. Для пробной функции вида

$$\Psi(r,\ \theta)=r^\alpha e^{-\beta r}\sin^n\theta \tag{14}$$

энергия с $n_r=l=0$ по-прежнему выражается формулой (5), в которой, однако, следует заменить δ на некоторое эффективное значение $\delta_{\text{эфф}}$, причем даже в случае сильной анизотропии ($\gamma\leqslant 0.1$) $\delta_{\text{эфф}}\leqslant 1.5\delta$ (в зависимости от значения самого δ). В случае слабой анизотропии ($\gamma=1-\nu$, $\nu<1$) эффективное значение радиуса изменяется с ν весьма медленно

$$\delta_{\text{эфф}}=\delta(1-1/45\nu^2). \tag{15}$$

Таким образом, условия спектроскопического обнаружения сверхатомов с характерными размерами ядра $R_c\sim 100$ Å различны при разных значениях параметра δ. В диэлектрической матрице с малым $a_{\text{кул}}$, т. е. с $\delta\gg 1$, относительно небольшие изменения размера и формы сверхатома (порядка постоянной решетки) будут приводить к достаточно сильному смещению уровней энергии, поэтому необходимо наблюдать изолированный сверхатом. Наоборот, в полупроводниковой матрице с большим $a_{кул}$, т. е. $\delta \leqslant 1$, положение основного состояния значительно менее чувствительно к изменению параметров сверхатома, можно создавать и исследовать массив сверхатомов. В этом случае будет полностью применима вся техника исследования экситонных состояний. Заметим в заключение, что в любом из указанных случаев должны наблюдаться сильные нелинейности транспортных свойств.

Список литературы

[1] Watanabe H., Inoshita T. // Optoelectron. Device Technol. 1986. V. 1. P. 33—38.
[2] Timofeev V. B. // Excitons. Selected Chapters / Ed. E. I. Rashba, M. D. Sturze. North-Holland Amsterdam, Oxford, New York, Tokyo, 1987. P. 273—332.
[3] Scherer A., Craighead H. G. // Appl. Phys. Lett. 1986. V. 48. P. 30—32.
[4] Чаплик А. В. // Письма в ЖЭТФ. 1989. Т. 50. № 1. С. 38—40.
[5] Wu W.-Y., Schulman J. N., Hsu T. Y., Efron U. // Appl. Phys. Lett. 1987. V. 51. N 10. P. 710—712.
[6] Shum K., Tang G. C., Junnarkar M. R., Alpano R. R. // Appl. Phys. Lett. 1987. V. 51. N 22. P. 1839—1841.
[7] Miller D. A. B., Chemba D. S., Schmitt-Rink S. // Appl. Phys. Lett. 1988. V. 52. N 25. P. 2154—2156.
[8] Богомолов В. Н. // УФН. 1978. Т. 24. № 2. С. 171—182.
[9] Богомолов В. Н., Задорожный А. И., Павлова Т. М. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1980. Т. 31. № 7. С. 406—409.
[10] Inoshita T., Ohnishi S., Oshiyama A. // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 57. P. 2560.
[11] Сумбаев О. И. // УФН. 1978. Т. 124. № 2. С. 281—324.
[12] Андрюшин Е. А., Быков А. А. // УФН. 1988. Т. 154. № 1. С. 123—132.
[13] Флюгге З. Задачи по квантовой механике. М.: Мир, 1974. Т. 1. С. 187—341.

Физический институт
им. П. Н. Лебедева АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
24 июля 1990 г.