

УДК 539.537.535

© 1991

ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ КУЛОНОВСКОГО ЦЕНТРА В ТОНКОМ ПОЛУПРОВОДНИКОВОМ СЛОЕ

А. Г. Жилич

Получено уравнение для адиабатических потенциалов электрона на кулоновском примесном центре, расположенном в средней плоскости тонкого плоскопараллельного полупроводникового слоя, ограниченного бесконечно высокими потенциальными стенками. Предложен способ приближенного решения уравнения Шредингера, описывающего движение захваченного центром электрона в плоскости слоя. Приведены результаты расчета энергии трех низших уровней квазикулоновской серии, примыкающей к основному уровню пространственного квантования.

В последние годы большое внимание экспериментаторов и теоретиков привлечено к изучению электронных и связанных с ними оптических свойств тонких слоев и пленок [1]. В частности, представляет интерес задача о примесных и экситонных состояниях в тонких полупроводниковых слоях.

В настоящей работе рассматривается кулоновский примесный центр в тонком плоскопараллельном слое полупроводника. Предполагается, что слой ограничен бесконечно высокими потенциальными стенками. Мы будем считать, что толщина слоя a меньше размеров трехмерного кулоновского центра

$$a < \kappa_0 \hbar^2 / m^* e^2 \equiv a_c,$$

m^* — эффективная масса захваченного центром носителя; для определенности дальше будем говорить об электроне. Очевидно, что пространственная ограниченность движения электрона размерами потенциальной ямы должна существенно сказаться на энергии его связи. Взаимодействие электрона с центром обычно сильно ослаблено большой диэлектрической проницаемостью κ_0 . Однако в ряде теоретических работ [2] показано, что если полупроводниковая среда имеет размеры порядка радиуса связанного состояния и окружена средой с много меньшей диэлектрической проницаемостью, то кулоновское взаимодействие с центром может сильно увеличиться благодаря действию поля, создаваемого центром и электроном в окружающей полупроводник среде, причем может существенно измениться и закон взаимодействия. В настоящей работе предполагается, что диэлектрическая проницаемость окружения близка к проницаемости в слое, и эффектом самодействия пренебрегается.

1. Будем далее полагать, что центр кулоновской примеси расположен в средней плоскости слоя, куда и поместим начало цилиндрической системы координат ρ, φ, z с осью z , направленной перпендикулярно плоскости слоя. Волновая функция электрона внутри ямы может быть представлена в виде

$$\Psi_{lnm}(\mathbf{r}) = (1/\sqrt{2\pi}) e^{im\varphi} \psi_{lnm}(\rho, z), \quad (1)$$

где l нумерует состояния движения поперек слоя; n — главное квантовое число, определяющее энергию движения в плоскости слоя. После перехода к единице длины $a_0/2$ функция $\psi_{lnm}(\rho, \varphi)$ удовлетворяет уравнению

$$-\left(\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{m^2}{\xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \psi_{lnm} - \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + x^2}} \psi_{lnm} = \mathcal{E} \psi_{lnm} \quad (2)$$

с симметричным граничным условием

$$\psi_{lnm}(\xi; \pm a/a_0) = 0, \quad (3)$$

где $\xi = 2\rho/a_0$, $x = 2z/a_0$, $\mathcal{E} = (\kappa_0^2 \hbar^2 / 2\mu e^4) E$, E — полная энергия электрона.

В рассматриваемом случае, когда движение по координате z ограничено узкой ямой с бесконечно высокими стенками, расстояние между уровнями пространственного квантования без учета кулоновского взаимодействия $\Delta_l^{(0)}$ ($l=0, 1, 2, \dots$) может значительно превышать энергию движения в плоскости слоя, а среднее значение координаты ξ : $\xi \sim 1 \gg x \sim d$ (d — полутолщина слоя в ед. $a_0/2$). Это позволяет считать движение электрона в плоскости слоя в связанном состоянии медленным по сравнению с движением поперек слоя (координата x) и использовать при решении уравнения (2) адиабатическое приближение. В этом приближении

$$\psi_{lnm}(\rho, z) = (1/\sqrt{\xi}) \chi_{lnm}(\xi) \Phi_l(\xi; x). \quad (4)$$

Функция $\Phi_l(\xi; x)$, описывающая при фиксированном ξ быстрое движение, в области $-d \leq x \leq d$ определяется уравнениями

$$\partial^2 \Phi_l / \partial x^2 + (\varepsilon_l(\xi) + 1/\sqrt{\xi^2 + x^2}) \Phi_l = 0, \quad (5)$$

$$\Phi_l(\xi; \pm d) = 0. \quad (5a)$$

При $|x| > d$ полагаем $\Phi_l(\xi; x) = 0$.

Собственные значения уравнения $\varepsilon_l(\xi) \equiv \Delta_l^{(0)} + U_l(\xi)$ должны служить потенциалами для медленного движения в плоскости слоя.

2. Исследуем функции $\varepsilon_l(\xi)$ в предельных случаях $\xi > d$ и $\xi \ll d$ (при этом предполагается, что всегда $d < 1$). Ограничимся далее только четными относительно $x \rightarrow -x$ решениями уравнения, соответствующими уровням, переходы на которые из основного состояния происходят под действием света, поляризованного в плоскости слоя.

При $\xi > d$ простой расчет по теории возмущений с четными функциями нулевого приближения

$$\Phi_l^{(0)}(x) = d^{-1/2} \cos \frac{2l+1}{2d} \pi x \quad (6)$$

дает

$$\varepsilon_l(\xi) = \Delta_l^{(0)} - \frac{1}{\xi} + \frac{1}{6} \frac{d^2}{\xi^3} \left[1 - \frac{6}{(2l+1)^2 \pi^2} \right] - \frac{3}{40} \frac{d^4}{\xi^5} \left[1 - \frac{5}{9} \frac{1}{(2l+1)^2 \pi^2} + \frac{10}{3} \frac{1}{(2l+1)^4 \pi^4} \right], \quad \Delta_l^{(0)} = \frac{(2l+1)^2 \pi^2}{4d^2}. \quad (7)$$

Из выражения (7) видно, что при всех $\xi \geq d$ потенциалы $\varepsilon_l(\xi)$ близки к двумерному кулоновскому.

Для малых ξ адиабатические потенциалы можно найти методом последовательных приближений, интегрируя уравнение (5) от $x=0$ с условиями $\Phi_l(\xi; 0) = \text{const}$ и (5a). Если в получаемом так приближенном решении ограничиться лишь членами $\sim |\ln \xi|$ и членами, не зависящими от ξ , то для $\varepsilon_l(\xi)$ при $\xi < d$ получается уравнение

$$\cos \sqrt{\varepsilon} d - \left(\frac{\sin \sqrt{\varepsilon} d}{\sqrt{\varepsilon}} - \frac{8}{3\varepsilon} \sin^2 \frac{\sqrt{\varepsilon} d}{2} \right) \ln \frac{2d}{\xi} + \frac{4}{3} \frac{\sin \sqrt{\varepsilon} d}{\sqrt{\varepsilon}} - \frac{1}{3} d = 0. \quad (8)$$

Решения этого уравнения в общем случае можно найти численно.

В пределе $\xi \rightarrow 0$ (при конечном фиксированном d) наименьший уровень $\varepsilon_0(\xi) < 0$, $|\varepsilon_0| \gg 1$, и в приближении $\ln(2d/\xi) \gg 1$ уравнение (8) дает

$$\varepsilon_0(\xi) \simeq -[\ln(2d/\xi)]^2, \quad d = de^{-\varepsilon_0}. \quad (9)$$

Это выражение сходно с выражением для энергии относительного движения вдоль поля (если ξ — магнитная длина) в задаче об экситоне в предельно сильном магнитном поле [3].

3. Найдем теперь низшие уровни энергии электрона. Поскольку при больших ξ , начиная с $\xi \sim d$, адиабатические потенциалы для всех l близки к двумерному кулоновскому, волновая функция χ_{lnm} , описывающая движение в плоскости слоя, при $\xi \geq d$ должна достаточно хорошо определяться уравнением

$$\frac{d^2 \chi_{lnm}}{dt^2} + \frac{1}{t^2} \left(\frac{1}{4} - m^2 \right) \chi_{lnm} - \frac{1}{4} \chi_{lnm} + \frac{n}{2t} \chi_{lnm} = 0, \quad (10)$$

где $t = 2\xi/n$, $1/n = \sqrt{-(\mathcal{E} - \Delta_l^{(0)})}$, $l = 0, 1, 2, \dots$.

Убывающие при $t \rightarrow \infty$ решения уравнения (10) выражаются через функции Уиттекера

$$\chi_{lnm}(t) = B_{nm} W_{n/2, m}(t), \quad W_{n/2, m}(t)_{t \rightarrow \infty} \sim t^{n/2} e^{-t/2}, \quad (11)$$

где B_{nm} — нормировочный множитель.

С другой стороны, при малых ξ ($\xi \ll d < 1$) уравнение Шредингера для состояний $l=0$ с учетом (9) имеет вид

$$\frac{d^2 \chi_{0nm}}{dt^2} + \left(\frac{1}{4} - m^2 \right) \frac{1}{t^2} \chi_{0nm} - \frac{1}{4} \chi_{0nm} + \frac{n^2}{4} \left(\ln^2 \frac{4\bar{d}}{nt} + \Delta_0^{(0)} \right) \chi_{0nm} = 0. \quad (12)$$

Достаточно точные решения этого уравнения можно получить, интегрируя его методом последовательных приближений от $t=0$. При $m=0$ такая итерационная процедура дает

$$\chi_{0n0}(t) \simeq B_{n0} \left(\sqrt{t} + \frac{n^2}{16} t^{5/2} \ln^2 t + \Theta_{s/2}(n) t^{5/2} + \bar{\Theta}_{s/2}(n) t^{5/2} \ln t + \dots \right). \quad (13)$$

Чтобы найти приближенные собственные функции χ_{0n0} , имеющие при больших и малых ξ соответственно вид (11) и (13), потребуем, чтобы в некоторой промежуточной области ξ , где основную роль в (13) играют члены $t^{s/2}$ ($s \geq 5$), коэффициенты $\Theta_{s/2}(n)$ и $\bar{\Theta}_{s/2}(n)$ в (13) совпадали с известными соответствующими коэффициентами в разложении функции Уиттекера [4]. Заметим, что, как показывает расчет, при всех d $|\Theta_{s/2}|$ и $|\bar{\Theta}_{s/2}| \geq n^2/16$ (коэффициент при $t^{5/2} \ln^2 t$). Такое требование приводит к следующему уравнению для отыскания квантового числа n :

$$\frac{\Theta_{s/2}}{\bar{\Theta}_{s/2}} \equiv \frac{1/n^2 - 2 \ln(4\bar{d}/n) - \ln^2(4\bar{d}/n) - 3/2 - \Delta_0^{(0)}}{2 [\ln(4\bar{d}/n) + 1]} = 2C + \psi\left(\frac{1-n}{2}\right) - \frac{3n^2 + 1}{n^2 + 1}, \quad (14)$$

где $C = 0.577 \dots$ — постоянная Эйлера, $\psi(x) = (d\Gamma(x)/dx)/\Gamma(x)$.

Выполнение условия (14) обеспечивает плавный переход разложения (13) при $\xi \ll d$ через промежуточную область $\xi \sim d$, где потенциал $\epsilon_0(\xi)$, вообще говоря, нам не известен, в функцию (11) при $\xi > d$. Этим определяется квантовое число n .

Для низших по энергии состояний с квантовым числом $|m|=1$ аналогичная процедура при $\xi \ll d < 1$ дает

$$\chi_{0n1}(t) \simeq B_{n1} \left(t^{3/2} - \frac{1}{32} n^2 t^{7/2} \ln t + \Theta_{7/2}(n) t^{7/2} + \bar{\Theta}_{7/2}(n) t^{7/2} \ln t + \dots \right). \quad (15)$$

При $\xi \geq 1$ функция χ_{0n1} выражается формулой (11) с $m=1$. Условие для отыскания главного квантового числа получается из требования равенства коэффициентов $\Theta_{7/2}$ и $\bar{\Theta}_{7/2}$ в (15) соответствующим коэффициентам в разложении функции Уиттекера

$$\frac{\Theta_{7/2}}{\bar{\Theta}_{7/2}} \equiv \frac{1/n^2 - (3/2) \ln(4\bar{d}/n) - \ln^2(4\bar{d}/n) - 7/8 - \Delta_0^{(0)}}{2 [\ln(4\bar{d}/n) + 1]} = 2C + \psi\left(\frac{3-n}{2}\right) + \frac{2}{9} \frac{9 + 24n - 25n^2}{n^2 + 3} + \frac{8}{(n^2 + 1)(n^2 + 3)}. \quad (16)$$

Уровни серии, сходящиеся к основному уровню пространственного квантования $l=0$, определяются формулой

$$E_n = \hbar^2 \pi^2 / 2m^* a^2 - 2m^* e^4 / \chi_0^2 \hbar^2 n^2 (d). \quad (17)$$

В пределе $d \rightarrow 0$ из уравнений (14), (16) следует

$$n(d) \simeq n_0 - \frac{16d^2}{\pi^2} \frac{\ln(4d/n_0)}{1 + (4d/\pi^2) \ln^2(4d/n_0)}, \quad n_0 = 1, 3, 5, \dots, \quad (18)$$

т. е. при $d \rightarrow 0$ (17) естественно переходит в серию уровней двумерной кулоновской задачи.

На рис. 1 приведены результаты расчета по формулам (14) числа $n(d)$ для основного уровня ($n_0=1, m=0$). На рис. 2 дана зависимость $n(d)$

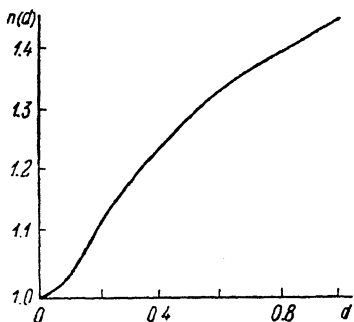


Рис. 1. Зависимость квантового числа n от толщины слоя $d=a/a_0$ для основного состояния — низшего уровня серии $l=0$.

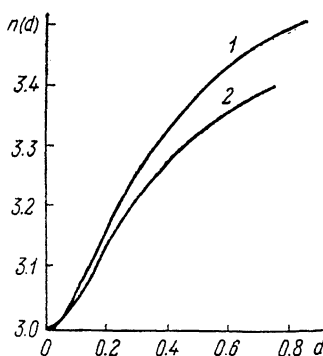


Рис. 2. Зависимость квантового числа n от толщины слоя $d=a/a_0$ для первых возбужденных уровней серии $l=0$.

для первых возбужденных уровней $n_0=3, m=0$ (1) и $n_0=3, m=1$ (2), найденная решением уравнений (14) и (16). Заметим, что в предельном случае $d \rightarrow \infty$ спектр должен представлять собой «обычную» трехмерную серию. В формуле (17) этому соответствуют числа $n_\infty=2, 4, \dots$, хотя, конечно, прямой переход $d \rightarrow \infty$ в (14) и (16) делать нельзя.

4. Оптические переходы в дипольном приближении разрешены между дискретными уровнями с правилом отбора $\Delta m = \pm 1$. Матричный элемент перехода между основным уровнем и уровнем $n_0=3, m=\pm 1$, определяющий интенсивность переходов с испусканием или поглощением фотонов с правой и левой круговой поляризацией в плоскости слоя, вычисленный на функциях нулевого приближения ($d \rightarrow 0$), равен

$$D = \frac{eA_0}{mc} \int \Psi_{010}^* (\hat{p}_x \pm i\hat{p}_y) \Psi_{031} d\tau = -\frac{ie\hbar}{2\pi m} A_0 \int_0^\infty f_{10}(\rho) e^{i\mp\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \rho} \mp i \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \times \\ \times e^{\pm i\varphi} f_{31}(\rho) \rho d\rho = \frac{ie\hbar}{m\omega a_0} \tilde{E}_0 \cdot \frac{3}{2} \sqrt{\frac{3}{2}}, \quad (19)$$

где A_0, \tilde{E}_0 — вектор-потенциал и напряженность поля излучения; $f_{n,m} = (1/\sqrt{\rho}) \chi_{0n,m}$.

5. Решение задачи в случае, когда кулоновский центр сдвинут от средней плоскости слоя, более сложно. Теперь адиабатический потенциал для каждого положения центра b должен быть определен как собственное значение уравнения (5) для функции $\Phi(\xi; x)$, представляющей собой обращающуюся в нуль на границах слоя $a/2 - b, a/2 + b$ линейную комбинацию четного и нечетного относительно центра решений уравнения (5). Разброс положений центров по толщине слоя приведет к появлению вместо дискретных уровней связанных состояний непрерывных полос, форма

которых будет определяться конкретным распределением центров по толщине слоя.

6. Полученные результаты пригодны при толщинах слоя $d \leq a_0$ и могут быть использованы при анализе оптических спектров одиночных двумерных квантовых ям или слоистых структур с двумерными квантовыми ямами, представляющих собой слой некоторого полупроводника, окруженного структурно сходным полупроводником с большей шириной запрещенной зоны, например слой GaAs, окруженный $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Более подробное обсуждение экспериментальных и теоретических аспектов задач о квантоворазмерных состояниях можно найти в монографии [5].

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Эфрос Ал. Л. // ФТП. 1986. Т. 20. № 7. С. 1281—1287.
- [2] Келдыш Л. В. // Письма в ЖЭТФ. 1979. Т. 29. № 11. С. 716—719; Андришин Е. А., Силин А. П. // ФТТ. 1980. Т. 22. № 9. С. 2676—2680.
- [3] Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. // ЖЭТФ. 1967. Т. 53. № 2. С. 717—725.
- [4] Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М., 1971. 1108 с.
- [5] Покатилов Е. П., Фомин В. М., Берил С. И. // Колебательные возбуждения, поляроны и экситоны в многослойных системах и сверхрешетках. Кишинев, 1990. 278 с.

Ленинградский
государственный университет

Поступило в Редакцию
3 мая 1990 г.
В окончательной редакции
4 сентября 1990 г.