01;06

Энергетический спектр носителей в квантовой точке формы сильно сплюснутого эллипсоида вращения

© Г.Г. Зегря, О.В. Константинов, А.В. Матвеенцев

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург

Поступило в Редакцию 28 марта 2002 г.

Разработана новая методика введения криволинейных координат для сплюснутого эллипсоида вращения. Она справедлива при параболическом изотропном законе дисперсии носителей. Благодаря этой методике в настоящей работе были получены простые аналитические формулы для энергетического спектра носителей в сплюснутой квантовой точке. Они дают уровни двух типов: первый тип характеризуется квантовым числом, соответствующим движению носителя в основном вдоль короткой оси эллипсоида. Расстояния между такими уровнями оказываются большими. В квантовой яме InAs, в обкладках GaAs, у электронов помещается, как правило, лишь один такой уровень. Второй тип уровней характеризуется квантовым числом, соответствующим движению носителя вдоль длинной оси эллипсоида. Расстояния между этими уровнями оказываются малыми. В квантовой точке помещается в ряде случаев много таких уровней. Их число очень быстро нарастает с ростом степени сплюснутости эллипсоида.

1. Введение. Хорошо известен случай квантовой ямы, когда движение в плоскости ямы вообще не квантовано и сплошной спектр бокового движения образует зону. Дно зоны соответствует уровню первого типа. Важно отметить, что в квантовой яме наинизшему такому уровню соответствует безузельная волновая функция. В работах [1,2] по теории уровней в квантовых точках (КТ) считалось, что наинизшее состояние КТ имеет другой тип, а именно описывается волновой функцией с одним узлом в центре ямы. При параболическом законе дисперсии такой уровень в яме не мог поместиться. Поэтому в [2] был использован непараболический закон дисперсии, в рамках которого было возможно существование состояния с одним узлом в центре КТ. В настоящей работе мы показали, что для сильно сплюснутого эллипсоида вращения возможно существование основного связанного состояния, волновая функция которого не имеет узла, подобно тому как это имеет место в квантовой яме. Этот уровень сопровождается субструктурой состояний с различными квантовыми числами, соответствующей движению вдоль длинной оси эллипсоида.

2. Эллипсоидальная модель КТ. Пусть форма КТ задается следующим уравнением:

$$\frac{x^2+y^2}{b^2}+\frac{z^2}{r^2}=1, \tag{1}$$

где r — малая полуось эллипсоида вращения, b — его большая полуось. Обозначим через n множитель, соответствующий этой полуоси, $b=nr$. Введем систему координат типа сферической, в которой поверхность эллипсоида будет иметь вид сферы, $r=\text{const}$:

$$x=n\cdot r\cdot\sin\theta\cdot\cos\varphi,\quad y=n\cdot r\cdot\sin\theta\cdot\sin\varphi,\quad z=r\cos\theta. \tag{2}$$

Эта система не удобна, однако, тем, что данные криволинейные координаты не ортогональны. Чтобы убедиться в этом, следует написать квадрат элемента длины:

$$ds^2=dx^2+dy^2+dz^2, \tag{3}$$

где dx, dy, dz — дифференциалы декартовых координат, связанные с криволинейными координатами r, θ, φ соотношениями (2). Вычисляя квадрат дифференциала длины, получим его в следующей форме:

$$ds^2=dr^2+r^2d\theta^2+n^2r^2\sin^2\theta\cdot d\varphi^2+(n^2-1)[\sin\theta\cdot dr+r\cdot\cos\theta\cdot d\theta]^2. \tag{4}$$

Из этой формулы видно, что криволинейные координаты r, θ ортогональны друг другу только при $n=1$. Сделаем замену переменных:

$$R=r\cdot\sin\theta;\qquad dR=\sin\theta dr+r\cos\theta d\theta. \tag{5}$$

Тогда получим

$$ds^2=dr^2+r^2d\theta^2+n^2R^2d\varphi^2+(n^2-1)dR^2. \tag{6}$$

Рассмотрим предельный случай сильно сплюснутого эллипсоида $n\gg 1$. При этом членом $r^2d\theta^2$ можно пренебречь и криволинейные координаты r, R, φ становятся ортогональными, поскольку квадрат длины дуги не содержит перекрестных произведений дифференциалов криволинейных координат:

$$ds^2=dr^2+n^2dR^2+n^2R^2d\varphi^2. \tag{7}$$

Перед квадратами дифференциалов криволинейных координат в формуле (7) стоят квадраты коэффициентов Ламе [3]. В этих координатах они будут иметь вид:

$$H_r = 1; \qquad H_R = n; \qquad H_\varphi = nR. \tag{8}$$

С их помощью нетрудно построить лапласиан для сильно сплюснутого эллипсоида ($n \gg 1$), как это сделано, например, в [3]:

$$\nabla^2\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2} + \frac{1}{n^2}\left[\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial R}\left(R\frac{\partial\Psi}{\partial R}\right) + \frac{1}{R^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2}\right]. \tag{9}$$

Этот лапласиан похож на лапласиан в цилиндрической системе координат.

3. Субструктура квантовых уровней. Рассмотрим уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi = E\Psi, \tag{10}$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(k^2 + p^2) = E(k) + E(p), \tag{11}$$

здесь k и p — дискретные компоненты квазиволнового вектора, значения которых определяются граничными условиями данной задачи. Граничные условия по переменным φ и R задаются цикличностью волновой функции. Что же касается переменной r, то граничное условие будет состоять в конечности и непрерывности волновой функции при $r = 0$ и непрерывности ее самой и ее производной по нормали на поверхности сферы $r = a$. При таких граничных условиях в гамильтониане (10) можно осуществить разделение переменных. Для этого будем искать волновую функцию в виде произведения трех функций:

$$\Psi = e^{iM\varphi} \cdot \chi(R) \cdot \eta(r). \tag{12}$$

Ввиду периодичности волновой функции по переменной φ квантовое число M должно быть целым, $M = 0, 1, 2, 3, \ldots$ Согласно (11), энергия является суммой двух слагаемых. Первое слагаемое $E(k)$ — это энергия уровней, соответствующих движению электрона по радиусу r. Спектр этих энергий имеет большие расстояния между уровнями. Второе слагаемое $E(p)$ описывает субструктуру и соответствует движению электрона в основном в направлении большой полуоси эллипсоида.

После разделения переменных уравнение (11) дает два одномерных уравнения. Одно уравнение, для движения по радиусу, приводит к основному состоянию с безузельной волновой функцией $\eta(r) = \cos kr$. Другое уравнение, для движения вдоль длинной оси, будет иметь вид:

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dR}\left(R\frac{d\chi}{dR}\right) - \frac{M^2}{R^2}\chi = -p^2n^2\chi^2. \tag{13}$$

В силу конечности решения при $R = 0$ решение (13) выражается через функцию Бесселя с целым индексом M:

$$\chi(R) = J_M(KR), \quad K = p \cdot n. \tag{14}$$

Изменим далее начало отсчета полярного угла, для чего введем вместо переменной θ переменную θ': $\theta' = \frac{\pi}{2} - \theta$, $R = r\cos\theta'$. Пределы изменения переменных будут следующие: $-\pi/2 < \theta' < \pi/2$, $-a < R < a$. Если M четное, то решение будет описывать четную функцию $\Psi(R) = \Psi(-R)$. Тогда граничное условие при $\theta' = \pi/2$ $(R = 0)$ состоит в том, что производная должна быть непрерывной. Поскольку функция χ должна быть четной по углу θ', то производная должна обратиться в нуль при $\theta' = \pi/2$, т.е. при $R = 0$, иначе функция будет иметь излом. Итак, граничное условие при M четном будет состоять в равенстве нулю производной при $R = 0$, т.е. $j'_M = 0$. Если M нечетное, то решение будет описывать нечетную функцию $\Psi(R) = -\Psi(-R)$. Тогда граничное условие при $\theta' = \pi/2$ $(R = 0)$ состоит в том, что функция равна нулю, т.е. $J_M = 0$:

$$J'_M(P) = 0, \quad M = 0, 2, \ldots; \qquad J_M(Q) = 0, \quad M = 1.3, \ldots \tag{15}$$

Корни этих уравнений приведены, например, в справочнике [4]. Каждый корень характеризуется номером s: $P \equiv P_s(M)$, $Q \equiv Q_s(M)$, $s = 1, 2, 3 \ldots$. Первые корни будут следующими: $P_1(0) = 0$, $P_1(2) \approx 3.0$, $Q(1) = P_2(0) \approx 3.8$. Важно подчеркнуть, что уравнение для производной имеет нулевой корень, которому будет соответствовать энергия, равная нулю, для движения вдоль длинной оси.

4. Численные значения энергий уровней. Главная особенность решения состоит в том, что всегда имеется по крайней мере одно связанное состояние $E(k)$ при любой эффективной массе и любой потенциальной ступени на границе ямы. Поэтому теория, предлагаемая в настоящей работе, вполне позволяет моделировать энергетический спектр электрона в рамках параболической модели. Будем считать, что энергии электронов и дырок внутри ямы имеют параболический вид:

$$E_{c,v}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{c,v}}, \tag{16}$$

где $m_c = 0.027m_0$ — табличное значение эффективной массы электрона, $m_v = 0.41m_0$ — табличное значение эффективной массы дырки в кристалле InAs. Вне ямы в кристалле GaAs соответствующие эффективные массы будут:

$$m_{cB} = 0.065m_0, \qquad m_{vB} = 0.45m_0. \tag{17}$$

В этой области волновая функция описывается экспонентой $\exp(-qr)$, где

$$q^2 = \frac{2m_B}{\hbar^2}\left[\Delta E - E_{c,v}(k)\right], \tag{18}$$

где m_B — масса для электронов и дырок в GaAs дается согласно (17), а величины соответствующих потенциальных ступеней при $T = 300\,\mathrm{K}$ будут $\Delta E_c = 0.70\,\mathrm{eV}$, $\Delta E_v = 0.38\,\mathrm{eV}$. Дискретные значения радиальной компоненты волнового вектора внутри сферы определяются хорошо известным уравнением, которое следует из условия непрерывности функции и ее производной на границе сферы $r = a$:

$$\mathrm{tg}(ka) = -\frac{q}{k}. \tag{19}$$

Значения волнового вектора k, которые являются решениями (19), определяют энергии далеко отстоящих уровней в яме $E(k)$. Вычисления показывают, что в яме толщиной 24 Å состава InAs в обкладках GaAs помещается одно радиальное электронное состояние с энергией $E(k) = 0.53\,\mathrm{eV}$.

В рассматриваемом нами случае при толщине эллипсоида $d = 24$ Å и отношении полуосей $n = 8$ (при длине большой полуоси эллипсоида $l = 190$ Å) получается 4 энергетических состояния с волновыми функциями J_0, J_2, J_0, J_1, два последних состояния вырождены. Энергии этих состояний будут $E_0 = 0.53\,\mathrm{eV}$, $E_3 = 0.62\,\mathrm{eV}$, $E_1 = E_2 = 0.68\,\mathrm{eV}$. Для дырок (за счет большей массы) получаются два радиальных состояния. При этом каждому соответствует субструктура по угловым переменным. Основному состоянию по радиальной переменной соответствует 57 энергетических состояний по угловым переменным, которые помещаются внутри энергетического разрыва на границе КТ. Возбужденному состоянию с одним узлом по радиальной переменной соответствует 18 энергетических состояний по угловым переменным.

Рассмотрим еще два других набора размеров модельных квантовых точек. Первый — это 30 Å на 100 Å, где отношение полуосей $n = 3.33$. В этом случае для дырок получается 39 энергетических уровней. Минимальное значение энергии от потолка валентной зоны 0.058 eV. Для электронов в этом случае будет 2 энергетических уровня с энергией $E_0 = 0.453$ eV, $E_1 = 0.688$ eV. Второй случай — это КТ с размерами 30 Å на 300 Å, где отношение полуосей $n = 10$. Для электронов получается 12 уровней, а для дырок будет огромное количество состояний порядка нескольких сотен.

Список литературы

[1] *Asryan L.V., Suris R.A.* // Semicond. Sci. Technol. 1996. V. 11. P. 554.
[2] *Евтихиев В.П., Константинов О.В., Матвеенцев А.В.* // Письма в ЖТФ. 2001. Т. 27. В. 6. С. 65–70.
[3] *Смирнов В.И.* Курс высшей математики. М.: ГИТТЛ, 1954. Т. II. С. 340.
[4] *Handbook* of Math. Func. NBS USA, 1964.