

УДК 538.958, 538.915

Вплив матриці на енергетичний спектр водневоподібної домішки

Бойчук В. І., Білинський І. В., Лешко Р. Я., Шевчук І. С.

leshkoroman@mail.ru

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, кафедра теоретичної фізики,
вул. Стрийська 3, м. Дрогоби́ч, 82100

У роботі на основі точного розв'язку рівняння Пуассона для квантової точки із позитивно зарядженим іоном донора у її центрі визначено потенціальну енергію взаємодії іона домішки з електроном з врахуванням різних відомих значень діелектричних проникностей $InSb$ та $InAs_{1-x}Sb_x$. Використовуючи знайдену потенціальну енергію, точно розв'язано рівняння Шредінгера для водневоподібної домішки у цій системі. Досліджено вплив радіуса КТ та концентрації Sb у матриці на спектр електрона.

Вступ

Останнім часом проведено багато досліджень домішкових станів у різних обмежених системах, зокрема у квантових точках (КТ). Значна частина теоретичних робіт присвячена вивченню сферичних КТ у межах континуальної моделі, на основі якої отримують добре узгодження з експериментальними даними. У роботах [1–5] проведено перші теоретичні дослідження домішкових станів у КТ, отримано точні розв'язки рівняння Шредінгера з кулонівською потенціальною взаємодією між частинками. Ґрунтуючись на точних розв'язках, визначено також енергетичні стани донора, розташованого не в центрі сферичної КТ. Результати показали розщеплення та зміну порядку рівнів залежно від радіуса КТ, розташування донора і висоти квантової ями. Причиною розщеплення та зміни порядку рівнів є порушення симетрії системи та конкурування кулонівської взаємодії і просторового обмеження. Однак в цих роботах з метою спрощення обчислень використовувалося наближення, що діелектричні проникності середовищ однакові і дорівнюють середньому значенню. Такий підхід має очевидні недоліки. Особливо для гетеросистем, в яких існує велика відмінність між діелектричними проникностями. У роботі [5] враховано різницю між значеннями діелектричної проникності.

Однак вибрана потенціальна енергія взаємодії іона домішки з електроном містить розрив на поверхні гетеросистеми. Врахування діелектричних проникностей КТ і матриці, а також поляризаційних зарядів, що виникають на межах гетеросистеми, можуть значно змінювати величину ефективної потенціальної ями [6]. У роботі [7] показано, що врахування точного розв'язку рівняння Пуассона і Шредінгера для водневоподібної домішки значно змінює спектр порівняно з результатами [1–5]. Відомо також, що енергетичний спектр електрона у КТ залежить від параметрів матриці. Параметри кристала $InAs_{1-x}Sb_x$ можна варіювати, змінюючи концентрацію Sb і As . Для глибшого теоретичного розуміння властивостей домішок у КТ важливо знати залежність енергетичних спектрів КТ від параметрів матриці.

Зважаючи на все, сказане вище, у запропонованій роботі на основі точного розв'язку рівняння Пуассона для КТ з позитивно зарядженим іоном домішки у її центрі визначено потенціальну енергію взаємодії іона домішки з електроном, враховуючи діелектричні властивості КТ і матриці. Використовуючи знайдену потенціальну енергію, точно розв'язано рівняння Шредінгера для водневоподібної домішки у цій системі. Визначено вплив радіуса КТ та параметрів матриці на енергетичний спектр електрона.

Потенціал позитивно зарядженої частинки у центрі сферичної КТ

Розглядається сферична наногетеросистема радіусом a , у центрі якої знаходиться позитивний заряд q . КТ має діелектричну проникність ε_1 , а матриця – ε_2 .

Для того, щоб визначити потенціал створений зарядом q , необхідно розв'язати рівняння Пуассона у двох областях, яке внаслідок сферичної симетрії задачі має вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dr^2}\Phi_1(r) + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\Phi_1(r) &= -\frac{4\pi q}{\varepsilon_1}\delta(r), & r \leq a, \\ \frac{d^2}{dr^2}\Phi_2(r) + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\Phi_2(r) &= 0, & r > a. \end{aligned} \quad (1)$$

Відповідні розв'язки цих рівнянь запишуться так:

$$\Phi_1(r) = A_1 + \frac{A_2}{r}, \quad \Phi_2(r) = B_1 + \frac{B_2}{r}. \quad (2)$$

Невідомі коефіцієнти визначено з умов рівності потенціалу нулю на нескінченності, неперервності потенціалу та нормальної складової вектора індукції електричного поля на межах середовищ і теореми Гауса:

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{q(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 a}, & A_2 &= \frac{q}{\varepsilon_1}, \\ B_1 &= 0, & B_2 &= \frac{q}{\varepsilon_2}, \end{aligned} \quad (3)$$

Визначивши всі невідомі коефіцієнти, знайдено потенціал, який створює заряд q у центрі КТ.

Водневоподібна домішка у центрі сферичної КТ

Нехай у центрі сферичної наногетероструктури $InSb/InAs_{1-x}Sb_x$ знаходиться позитивно заряджений іон водневоподібної домішки ($q = e$). Параметри матриці (діелектрична проникність, ефективна маса, робота виходу електрона) залежать від концентрації Sb [8]:

$$\begin{aligned}\varepsilon(x) &= 15.15 + 1.65x, \\ m^*(x) &= 0.023 - 0.039x + 0.03x^2, \\ \chi(x) &= 4.9 - 0.31x \text{ eV.}\end{aligned}\quad (4)$$

У загальному випадку потенціальна енергія, що зумовлена розривом зон, набуде вигляду:

$$U(r, x) = \begin{cases} -U_0(x), & r \leq a, \\ 0, & r > a, \end{cases}$$

$$U_0(x) = \chi(x) - \chi(1) \geq 0. \quad (5)$$

Ефективні маси та діелектричні проникності гетероструктури визначаються з рівностей:

$$m^*(r, x) = \begin{cases} m^*(1), & r \leq a, \\ m(x), & r > a, \end{cases} \quad (6)$$

$$\varepsilon(r, x) = \begin{cases} \varepsilon(1), & r \leq a, \\ \varepsilon(x), & r > a. \end{cases} \quad (7)$$

Потенціальна енергія взаємодії електрона з іоном домішки, що одержана на основі розв'язку рівняння Пуассона (1), зобразиться формулою:

$$V(r, x) = -e^2 \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon(1)r} + \frac{\varepsilon(1) - \varepsilon(x)}{\varepsilon(1) \cdot \varepsilon(x) \cdot a}, & r \leq a, \\ \frac{1}{\varepsilon(x) \cdot r}, & r > a. \end{cases} \quad (8)$$

Якщо додати вирази (5) і (8), то одержимо повну потенціальну енергію електрона у КТ:

$$\Pi(r, x) = \begin{cases} \frac{-e^2}{\varepsilon(1) \cdot r} - U_1^*(a, x), & r \leq a, \\ \frac{-e^2}{\varepsilon(x) \cdot r}, & r > a, \end{cases} \quad (9)$$

де введено ефективну потенціальну яму:

$$U_1^*(a, x) = \frac{e^2}{a} \frac{\varepsilon(1) - \varepsilon(x)}{\varepsilon(1) \cdot \varepsilon(x)} + U_0. \quad (10)$$

З (10) видно, що ефективна потенціальна яма залежить від радіуса гетеросистеми та концентрації миш'яку у матриці. Оператор повної енергії системи запишеться так:

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m^*(r, x)} \nabla + \Pi(r, x), \quad (11)$$

Рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (11) розв'язується точно. Враховуючи сферичну симетрію задачі, хвильову функцію, що є розв'язком рівняння Шредінгера, можна подати у вигляді добутку радіальної та кутової складової:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (12)$$

де $Y_l^m(\theta, \varphi)$ – сферичні функції, l, m – орбітальне та магнітне квантові числа. Тоді можна записати радіальне рівняння Шредінгера для 2-х областей.

Область $r \leq a$. Радіальне рівняння Шредінгера має вигляд:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m^*(1)} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2 \cdot m^*(1) \cdot r^2} - \frac{e^2}{\varepsilon(1) \cdot r} - U_1^*(a, x) - E \right\} R_1(r) = 0. \quad (13)$$

У цій області можуть існувати стани з енергією як меншою, так і більшою за $-U_1^*(a, x)$. Тому рівняння (13) розглядається у цих двох діапазонах енергій. Нехай $E < -U_1^*(a, x)$. Якщо ввести безрозмірні величини за формулами: $\xi = \alpha_{1a} r$, $\alpha_{1a}^2 = -8m^*(1)(E + U_1^*(a, x))/\hbar^2$, $\lambda_1 = 2m^*(1)e^2/(\varepsilon(1)\hbar^2\alpha_{1a})$, $R_1(\xi) = \xi^{-1}\rho_1(\xi)$, то (13) зведеться до такого:

$$\frac{\partial^2 \rho_1(\xi)}{\partial \xi^2} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{\lambda_1}{\xi} - \frac{l(l+1)}{\xi^2} \right] \rho_1(\xi) = 0. \quad (14)$$

Рівняння Віттекера (14) має два лінійно незалежні розв'язки. Якщо врахувати умову скінченності хвильової функції у початку координат, то розв'язком рівняння (14) буде функція:

$$\rho_1(\xi) = C_1 e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{l+1} M(l+1-\lambda_1, 2l+2, \xi), \quad (15)$$

де $M(a, b, x)$ – гіпергеометрична функція першого роду [9]. Для іншої області енергій: $-U_1^*(a, x) < E < 0$ зручно ввести позначення $\xi = \alpha_{1b} r$, $\alpha_{1b}^2 = 2m^*(1)(E + U_1^*(a, x))/\hbar^2$, $\beta_1 = -m^*(1)e^2/(\varepsilon(1)\hbar^2\alpha_{1b})$, $R_1(\xi) = \xi^{-1}\rho_1(\xi)$. Тоді рівняння (13) одержиться у вигляді:

$$\frac{\partial^2 \rho_1(\xi)}{\partial \xi^2} + \left[1 - \frac{2\beta_1}{\xi} - \frac{l(l+1)}{\xi^2} \right] \rho_1(\xi) = 0. \quad (16)$$

Це рівняння Кулона. Розв'язок такого рівняння, що задовольняє умови скінченності хвильової функції, можна зобразити за допомогою гіпергеометричної функції:

$$\rho_1(\xi) = C_1 \frac{2^l e^{-\frac{\pi\beta_1}{2}} |\Gamma(l+1+i\beta_1)|}{\Gamma(2l+2)} \times e^{-i\xi} \xi^{l+1} M(l+1-i\beta_1, 2l+2, 2i\xi), \quad (17)$$

де $\Gamma(z)$ – гамма-функція Ейлера [9].

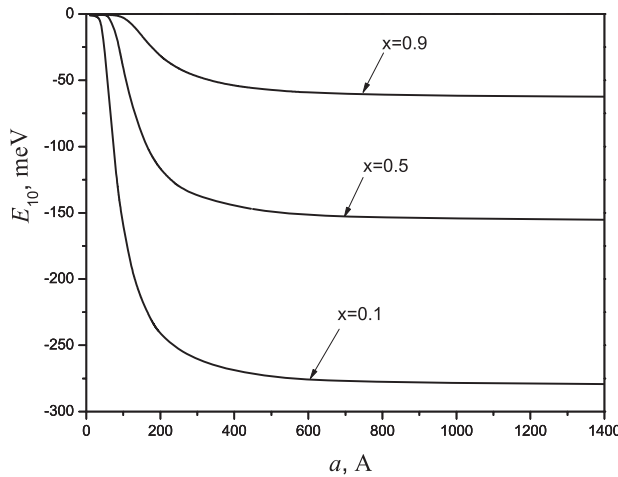


Рис.1. Енергія основного стану водневоподібної домішки для різних значень концентрації сурми в матриці

Область $r > a$. Радіальне рівняння у цій області записано так:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*(x)} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m^*(x)r^2} - \frac{e^2}{\varepsilon(x)r} - E \right\} R_3(r) = 0. \quad (18)$$

Визначаючи безрозмірні величини $\xi = \alpha_2 r$, $\alpha_2^2 = -8m^*(x)E/\hbar^2$, $\lambda_2 = 2m^*(x)e^2/(\varepsilon(x)\hbar^2\alpha_2)$, $R_2(\xi) = \xi^{-1}\rho_2(\xi)$, рівняння (18) можна перетворити у рівняння Віттекера:

$$\frac{\partial^2 \rho_2(\xi)}{\partial \xi^2} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{\lambda_2}{\xi} - \frac{l(l+1)}{\xi^2} \right] \rho_2(\xi) = 0. \quad (19)$$

Тоді розв'язок рівняння (19) має вигляд [9]:

$$\rho_3(\xi) = C_2 \frac{e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{-l}}{\Gamma(-l-\lambda_3)} \times \int_0^\infty dt e^{-\xi t} t^{-l-\lambda_3-1} (1+t)^{-l+\lambda_3-1}. \quad (20)$$

У випадку $E > 0$ енергетичний спектр стає неперервним.

Хвильова функція та потік густини ймовірності мають бути неперервними на межах гетероструктури:

$$\begin{aligned} R_1(r)|_{r=a} - R_2(r)|_{r=a} &= 0, \\ \frac{1}{m^*(1)} \frac{d}{dr} R_1(r) \Big|_{r=a} - \frac{1}{m^*(x)} \frac{d}{dr} R_2(r) \Big|_{r=a} &= 0, \\ \int d\mathbf{r} |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 &= 1. \end{aligned} \quad (21)$$

З цих умов, а також умови нормування, можна визначити власні значення та власні функції водневоподібної домішки у сферичній КТ.

Результати обчислень та їх аналіз

Розрахунок дискретного енергетичного спектру для електрона (E_{nl}) проведено за допомогою ЕОМ.

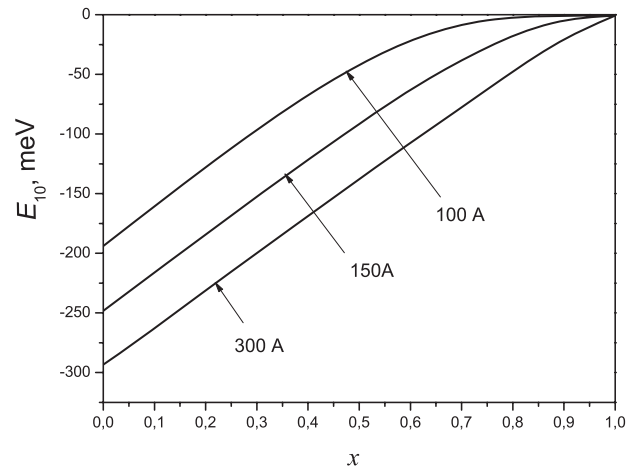


Рис.2. Залежність енергії основного стану домішки від концентрації сурми для різних радіусів КТ

На рис.1 подано залежність енергії основного стану домішки (E_{10}) від радіуса КТ для різних значень концентрації Sb .

Збільшення концентрації сурми в матриці веде до того, що властивості матриці і КТ стають ближчими (4). З рисунка видно, що для заданого радіуса КТ збільшення концентрації сурми зменшує енергію домішки. Це зумовлено тим, що, як видно з (5) і (7), зменшується величина розриву зон кристалів і відмінність між діелектричними проникностями. Отже, внаслідок збільшення x , зменшується ефективна потенціальна яма (10). Наведені міркування підтверджуються також залежністю енергії основного стану від концентрації Sb для фіксованого радіуса КТ (рис.2).

В області малих x одержано лінійну залежність $E_{10} = E_{10}(x)$. Якщо ж $x \rightarrow 1$, то властивості матриці і КТ збігаються, а енергетичні рівні домішки визначаються водневоподібними енергетичними рівнями домішки у масивному кристалі $InSb$ ($E = 0.67$ meV).

Крім основного стану, визначено також енергію збуджених станів. На рис.3 зображено залежності енергетичних рівнів E_{10} (крива 1), E_{11} (крива 2) і E_{20} (крива 3) від радіуса КТ для фіксованих значень x .

З рисунка видно, що для великих радіусів енергія електрона прямує до відповідних енергій водневоподібної домішки, що зменшена на величину ефективної потенціальної ями, яка для різних концентрацій сурми є різною. Зменшення радіуса КТ веде до того, що стани E_{11} , E_{20} , які вироджені у вільному атомі водню, розщеплюються внаслідок пониження симетрії простору. Зменшення радіуса КТ збільшує просторове обмеження і веде до зростання енергії частинки у будь-якому стані. Для радіусів КТ, що менші за ефективний борівський радіус електрон з більшою ймовірністю перебуває спричинює незначну зміну енергії, яка прямує до водневоподібної енергії у масивному кристалі.

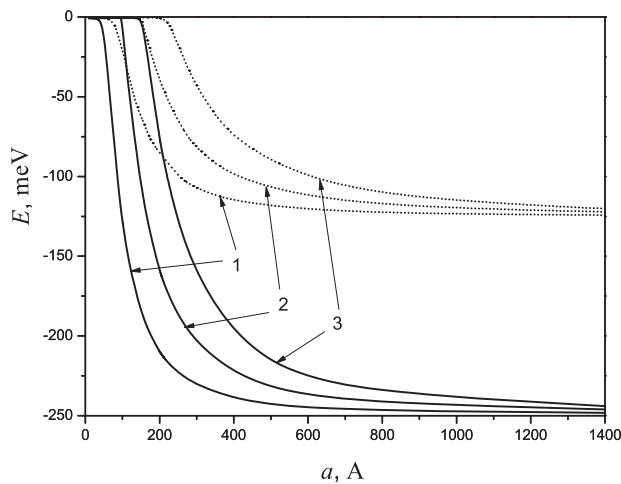


Рис.3. Енергія водневоподібної домішки для $x = 0.2$ (суцільні лінії), $x = 0.6$ (пунктирні лінії)

Висновки

Отже, у роботі, враховуючи залежність параметрів матриці гетероструктури від концентрації Sb , одержано точний розв'язок рівняння Пуассона для позитивно зарядженого іона домішки у центрі сферичної наногетероструктури, що дозволило встановити залежність повної потенціальної енергії електрона, ввівши ефективну потенціальну яму для електрона у гетероструктурі. З визначеною потенціальною енергією точно розв'язано рівняння Шредінгера для дискретного спектру водневоподібної домішки. Використовуючи ЕОМ визначено енергетичний спектр домішки для різних радіусів КТ і концентрації сурми.

Бібліографія

- [1] Zhu J.L. Exact solution of hydrogenic donor states in a spherically rectangular quantum well // Phys. Rev. B. – 1989. – 39, № 12. – P. 8780–8783.
- [2] Zhu J.L., Xiong J.J., Gu B.L. Confined electron and hydrogenic donor states in a spherical quantum dot of $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ // Phys. Rev. B. – 1990. – 41, № 9. – P. 6001–6007.
- [3] Zhu J.L., Chen X. Spectrum and binding energy of an off-center donor in a spherical quantum dot // Phys. Rev. B. – 1994. – 50, № 7. P. 4497–4502.
- [4] Yang C.C., Liu L.C., and Chang S.H. Eigenstates and fine structure of a hydrogenic impurity in a spherical quantum dot // Phys. Rev. B. – 1998. – 58, № 4. – P. 1954–1961.
- [5] Ткач М.В., Головацький В.А., Березовський Я.М. Спектр і хвильові функції водневоподібної домішки, розміщеної в центрі квантової точки // Фіз. і хім. тверд. тіла. – 2003. – 4, № 2. – P. 213–220.
- [6] Бойчук В.І., Кубай Р.Ю., Годованець Г.М., Шевчук І.С. Дослідження впливу поляризації на енергію електрона, дірки сферичної наногетеросистеми напівпровідників (на прикладі структур Si/SiO_2 , $\beta - HgS/CdS$) // ЖФД. – 10, № 3. – P. 220–226.
- [7] Boichuk V.I., Bilynskyi I.V., Leshko R.Ya. Ground and excited states of D^0 and D^- donors in a spherical quantum dot // Ukr. J. Phys. – 2008. – 53, № 10. – P. 991–996.
- [8] Новые полупроводниковые материалы: диагностика и свойства. Тематические базы данных. Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе (<http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/index.html>).
- [9] Abramowitz M. and Stegun I.A. Handbook of mathematical function with formulas, graphs, and mathematical tables. – Washington, D.C.: U.S. Government Printing Office, 1964. – 1046 p.