

©1994 г.

ЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР ДВУХ- И ТРЕХМЕРНЫХ КВАНТОВЫХ ЯМ НА ОСНОВЕ УЗКОЩЕЛЕВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Б.Г.Идлис, М.Ш.Усманов

Физический институт им. П.Н.Лебедева Российской академии наук, 117924, Москва, Россия
(Получена 8 июля 1993 г. Принята к печати 24 ноября 1993 г.)

На примере двух- и трехмерных квантовых ям, образованных узкощелевыми полупроводниками с взаимно инвертированными зонами, изучены спектры приграничных состояний. Показано, что от верхней и нижней зон объемного спектра отщепляется серия дискретных уровней, отличающихся значениями полного углового момента.

В последнее время наряду с исследованиями квантовых ям и полупроводниковых сверхрешеток возник интерес к исследованию двух- и трехмерных ограниченных квантовых структур. Современное состояние технологии позволяет создавать такие системы на основе узкощелевых полупроводников. Настоящая работа посвящена рассмотрению спектра приграничных состояний двух- и трехмерных ограниченных квантовых структур, образованных узкощелевыми полупроводниками с взаимно инвертированными зонами.

1. Как известно, в двухзонном приближении спектр структуры из узкощелевых полупроводников описывается уравнением типа Дирака [1]:

$$\left[\gamma^0 \cdot (\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p}) + \gamma^0 \Delta(\mathbf{r}) + G(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где $2\Delta(\mathbf{r})$ — ширина запрещенной зоны в точке \mathbf{r} ; $G(\mathbf{r})$ — работа выхода, также зависящая от координат; $\mathbf{p} = -i\nabla$, γ^j — матрицы Дирака. Здесь все энергетические параметры нормированы на величину $\hbar\vartheta$, где ϑ — постоянный матричный элемент межзонного перехода. Волновая функция Ψ представляет собой столбец из спиноров Ψ_1 и Ψ_2 , относящихся к двум ближайшим термам, формирующим зону проводимости и валентную зону полупроводниковой структуры.

Можно убедиться, что когда потенциалы Δ и G в уравнении (1) зависят только от модуля вектора $\boldsymbol{\rho} = (x, y, 0)$, гамильтониан (1) коммутирует с оператором J_z проекции полного углового момента на ось

z , и в качестве волновой функции можно выбрать собственные функции этого оператора

$$J_z \Psi_M = M \Psi_M, \quad (2)$$

где $M = \pm(1/2); \pm(3/2) \dots$ и $\Psi = \Psi(\rho) \exp(ip_z z)$. При этом уравнение для радиальной части волновой функции $R(\rho)$ приобретает вид [2]

$$\left[\gamma^0 \gamma^1 p_\rho + \gamma^0 \gamma^2 (M/\rho) + \gamma^0 \gamma^3 p_z + \gamma^0 \Delta(\rho) + G(\rho) \right] R(\rho) = E R(\rho), \quad (3)$$

где $p_\rho = -i\partial_\rho$. Теперь, если координатные зависимости $\Delta(\rho)$ и $G(\rho)$ определяется одной и той же функцией $f(\rho)$, а именно

$$\Delta(\rho) = \Delta_0 \cdot f(\rho) + \Delta_1, \quad G(\rho) = g_0 \cdot f(\rho), \quad (4)$$

то с помощью канонического преобразования $\hat{\Phi} = S_0 \hat{\chi} = \exp(\gamma^0 \omega/2) \hat{\chi}$, где $\text{tg}(\omega) = -g_0/\Delta_0$, уравнение (3) можно привести к виду

$$\left\{ \gamma^0 [\gamma^1 p_\rho + w(\rho)] + \gamma^0 \gamma^2 (M/\rho) + \gamma^0 \gamma^3 p_z \right\} \hat{\Phi}(\rho) = \tilde{\varepsilon} \hat{\Phi}(\rho), \quad (5)$$

где

$$w(\rho) = \left(\sqrt{\Delta_0^2 - g_0^2} \cdot f(\rho) + \frac{\Delta_0 \Delta_1 + E g_0}{\sqrt{\Delta_0^2 - g_0^2}} \right), \quad \tilde{\varepsilon} = \left(\frac{g_0 \Delta_1 + E \Delta_0}{\sqrt{\Delta_0^2 - g_0^2}} \right). \quad (6)$$

В результате квадрирования уравнения (5) получим

$$\hat{H}_1 \hat{\chi}_\pm(\rho) \equiv \left\{ \hat{p}_\rho^2 + \frac{M^2}{\rho^2} - \sigma_3 \frac{M}{\rho^2} + w^2(\rho) \mp \sigma_1 \frac{dw}{d\rho} \right\} \hat{\chi}_\mp = (\tilde{\varepsilon}^2 - p_z^2) \hat{\chi}_\mp. \quad (7)$$

В качестве функции $f(\rho)$ рассмотрим цилиндрическую прямоугольную яму радиусом a :

$$f(\rho) = (\mu + 1) \cdot \theta(\rho - a) - 1, \quad (8)$$

где параметр μ определяет глубину ямы, $\theta(\rho - a)$ — единичная ступенчатая функция. Такая зависимость $f(\rho)$ соответствует резкому изменению параметров (4) полупроводниковой структуры. В этом случае уравнение (7) можно решать в каждой области отдельно, с учетом того, что на границе производная $\chi_\pm(\rho)$ испытывает скачок (о выборе граничных условий для ограниченных квантовых структур из узкощелевых полупроводников, описываемых уравнением типа Дирака, см. [3-5]):

$$\frac{d\chi_\mp}{d\rho} \Big|_{\rho=a+} - \frac{d\chi_\mp}{d\rho} \Big|_{\rho=a-} = \mp(\mu + 1) \sqrt{\Delta_0^2 - g_0^2} \sigma_1 \chi_\mp(\rho) \Big|_{\rho=a}. \quad (9)$$

В результате получим следующее дисперсионное уравнение:

$$\frac{q_e \cdot q_i}{(\mu + 1)^2 (\Delta_0^2 - g_0^2) - q_e^2 - q_i^2} = \frac{I_m(q_i a) \cdot I_{m+1}(q_i a) \cdot K_m(q_e a) \cdot K_{m+1}(q_e a)}{I_{m+1}^2(q_i a) \cdot K_m^2(q_e a) + I_m^2(q_i a) \cdot K_{m+1}^2(q_e a)}, \quad (10)$$

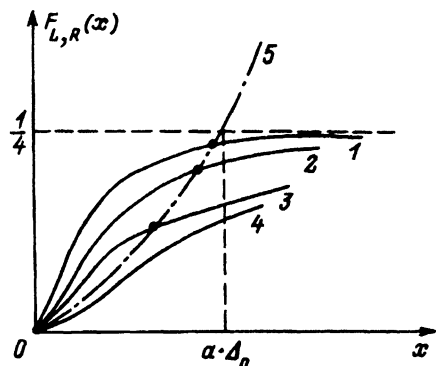


Рис. 1. К решению дисперсионного уравнения (11).

Кривые 1-4 соответствуют правой части уравнения для различных значений $a_1 > a_2 > a_3 > a_4$ при $m = \text{const}$ или $m_1 < m_2 < m_3 < m_4$ при $a = \text{const}$, $x = aq$, кривая 5 — левой части уравнения (11).

где $q_i^2 = (\Delta_0 - \Delta_1)^2 - (E + g_0)^2 + p_z^2$; $q_e^2 = (\mu\Delta_0 + \Delta_1)^2 - (E - \mu g_0)^2 + p_z^2$ и $m = (M - 1/2)$; $I_m(q_i a)$, $K_m(q_e a)$ — модифицированные функции Бесселя 1-го и 2-го рода.

Для простоты рассмотрим случай $\Delta_1 = g_0 = 0$ и $q_e^2 = q_i^2 + (\mu^2 - 1)\Delta_0^2$. Отметим, что вещественные значения q_i отвечают уровням, локализованным на границе раздела, мнимые значения q_i при вещественных q_e — уровням размерного квантования внутри цилиндрической ямы, а мнимые значения $q_{i,e}$ — делокализованным состояниям непрерывного спектра. При вещественных значениях q_i правая часть уравнения (10) положительна. Левая часть, равная в данном случае $q_i \cdot \sqrt{q_i^2 + (\mu^2 - 1)\Delta_0^2} / [2[(\mu + 1)\Delta_0^2 - q_i^2]]$, положительна только при $\mu > 0$. Отсюда следует, что приграничные состояния в цилиндрической квантовой яме возникают только в том случае, когда зоны полупроводников внутри и вне ямы взаимно инвертированы.

В простейшем случае «симметричной» ямы ($\mu = 1$, $q_i = q_e = q$) дисперсионное уравнение (10) приобретает вид

$$\frac{q^2}{4\Delta_0^2} = \frac{I_m(qa) \cdot I_{m+1}(qa) \cdot K_m(qa) \cdot K_{m+1}(qa)}{[I_{m+1}(qa) \cdot K_m(qa) + I_m(qa) \cdot K_{m+1}(qa)]^2}. \quad (11)$$

На рис. 1 для различных радиусов ямы показаны зависимости от $x = qa$ левой и правой частей уравнения (11) для некоторых значений m . В частности, при $a \rightarrow \infty$ решением (11) является $q = \Delta_0$ и $E = \mp P_z$, т.е. задача становится эквивалентной одномерному инверсному контакту [6], и нулевая мода оказывается бесконечнократно вырожденной по проекциям M полного углового момента на ось z . При уменьшении радиуса ямы вырождение по m , отвечающее различным по модулю

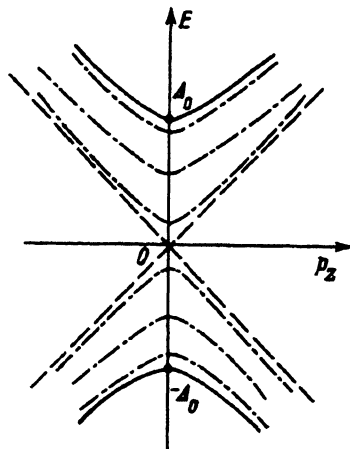


Рис. 2. Электронный спектр цилиндрической квантовой ямы, образованной узкощелевыми полупроводниками с инвертированными зонами.

Сплошные линии — границы объемного спектра, штриховые и штрихпунктирные линии — локализованные у границы цилиндра состояния при $a = \infty$ и конечных a соответственно.

значениям M , снимается и двукратно-вырожденный спектр локализованных состояний становится щелевым (рис. 2):

$$E = \pm \sqrt{\Delta_0^2 + p_z^2 - q^2}. \quad (12)$$

Число уровней внутри щели определяется максимальным значением углового момента, равного

$$2|M|_{\max} = \left[\sqrt{1 + 4\Delta_0^2 a^2} \right]. \quad (13)$$

Уровни с большим значением M попадают в непрерывный спектр. Очевидно, что существует критическое значение радиуса $a_c = 1/\sqrt{8}\Delta_0$, при котором все уровни внутри щели выталкиваются в непрерывный спектр и локализованные состояния отсутствуют.

Отметим также, что для случая квантовой точки из полупроводника с инвертированными зонами ($\mu \rightarrow \infty$ — бесконечно глубокая цилиндрическая яма) при $\Delta_1 = g_0 = 0$ из уравнения (10) получим следующее критическое значение для радиуса $a_c = 1/\Delta_0$, и число уровней внутри щели определяется условием $m + 1 < \Delta_0 a$ ($2|M|_{\max} = [2\Delta_0 a - 1]$). При этом нетрудно убедиться, что матричный элемент скорости $v = \langle \Psi_{M'} | \gamma^0 \gamma | \Psi_M \rangle$ для перехода $\epsilon_M \rightarrow \epsilon_{M'}$ имеет отличные от нуля компоненты как в плоскости основания цилиндра, так и поперек нее. Причем для света, поляризованного в плоскости основания цилиндра, разрешенными являются переходы с сохранением M , а для света, поляризованного вдоль направления e_z (ось z), разрешены переходы с изменением M . Таким образом, в этом случае в спектре поглощения света должны появляться дополнительные пики, связанные с переходами между локализованными состояниями (помимо переходов между уровнями размерного квантования [6]).

Заметим, что малое изменение формы ямы, например переход от круговой формы к эллиптической, приводит лишь к небольшому сдвигу энергетических уровней, что подтверждается расчетами с помощью теории возмущений по малому значению эксцентриситета эллипса. Все уровни по-прежнему остаются двукратно вырожденными. При этом если площадь «деформированного» в эллипс круга не меняется, то и сдвига уровней тоже не происходит.

2. Рассмотрим теперь трехмерную сферически-симметричную квантовую яму, образованную узкощелевыми полупроводниками. В этом случае «радиальная часть» волновой функции $\Psi = (1/r) \cdot \hat{\Phi}(r)$ удовлетворяет следующему уравнению [2]:

$$\left[\tau_2 \hat{P}_r + \frac{k}{r} \cdot \tau_1 + \tau_3 \Delta(r) + G(r) \right] \hat{\Phi}(r) = E \hat{\Phi}(r), \quad (14)$$

где $P_r = -i\partial_r$; τ_1, τ_2, τ_3 — матрицы Паули, действующие в пространстве индексов зон, $k = \pm 1, \pm 2, \dots$. Для одинаковой пространственной зависимости Δ и G [подобной (4) с заменой ρ на r] после квадрирования

уравнения (14) и последующего преобразования $\Phi(r) = \exp(\tau_3 \beta / 2) \cdot \chi(r)$, где $\text{th}(\beta) = g_0 / \Delta_0$, получим

$$\left\{ \hat{p}_r^2 + \frac{k^2}{r^2} + \tau_3 \frac{k}{r^2} + w^2(r) \mp \tau_1 \frac{dw}{dr} \right\} \hat{\chi} = \tilde{\varepsilon}^2 \hat{\chi}. \quad (15)$$

Здесь выражения для $w(r)$ и $\tilde{\varepsilon}$ такие же, как и (6) с точностью до замены ρ на r . Сравнение уравнений (15) и (7) показывает, что для сферической ямы дисперсионные уравнения совпадают с выражениями (10), (11), в которых надо положить $p_z = 0$ и $m = k - 1/2$. Анализ соответствующего дисперсионного уравнения проводится аналогично предыдущему разделу. При конечных радиусах сферической ямы спектр локализованных на границе состояний представляет собой набор дискретных уровней, кратность вырождения которых равна $2N$, где N — число различных проекций полного углового момента на ось z .

Авторы выражают благодарность Б.А.Волкову и М.М.Мусаханову за полезные обсуждения.

Список литературы

- [1] О.А. Pankratov, S.V. Pakhomov, B.A. Volkov. Sol. St. Commun., **61**, 93 (1987).
- [2] Б.Г. Идлис, М.Ш. Усманов. Препринт № 1, ФИ РАН (1993).
- [3] В.А. Волков, Т.Н. Пинскер. ФТТ, **23**, 1756 (1981).
- [4] Б.Г. Идлис, М.Ш. Усманов. ФТП, **26**, 329 (1992).
- [5] А.В. Колесников, А.П. Силин. Препринт № 21, ФИ РАН (1993).
- [6] Ал.Л. Эфрос, А.Л. Эфрос. ФТП, **16**, 1209 (1982).

Редактор В.В. Чалдышев