

Влияние локализации в квантовых ямах и квантовых проволоках на смешивание тяжелых и легких дырок и на энергию связи акцептора

© М.А. Семина[¶], Р.А. Сурис

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 20 декабря 2010 г. Принята к печати 27 декабря 2010 г.)

При помощи вариационного метода, учитывающего сложную структуру валентной зоны, проведено исследование влияния локализации в квантовых ямах и в квантовых проволоках на энергию связи акцептора. Построены пробные функции, позволяющие проследить переход от объемного материала к узким квантовым проволокам малого радиуса. Показана возможность появления немонотонной зависимости энергии связи акцептора от размера системы.

1. Введение

Наноструктуры — полупроводниковые квантовые ямы и квантовые проволоки — обладают ярко выраженной анизотропией. В таких системах движение носителей заряда в одном или нескольких направлениях является свободным, а в других — состояния локализованы, что наиболее ярко проявляется в транспортных и оптических свойствах таких систем. Как правило, переход от объемных материалов к низкоразмерным структурам сопровождается усилением межчастичного взаимодействия и увеличения энергий связи локализованных носителей. В данной работе продемонстрировано, что в системах со сложной структурой зон размерное квантование может приводить к уменьшению энергии связи кулоновских комплексов. В качестве примера рассматривается нейтральная акцепторная примесь (A^0), представляющая собой комплекс, состоящий из дырки, локализованной на отрицательно заряженном центре. Акцепторные примеси в значительной мере определяют оптические свойства вблизи края поглощения в структурах p -типа в объемных материалах [1–6] и квантовых ямах [7,8].

В рамках модели простой зоны энергии связи водородоподобного комплекса в объемном материале, идеальной двумерной квантовой яме и в квантовой проволоке малого радиуса составляют [9–11]:

$$E_b^{3D} = \frac{e^4 m_{3D}}{2\hbar^2 \epsilon^2}, \quad (1a)$$

$$E_b^{2D} = \frac{2e^4 m_{2D}}{\hbar^2 \epsilon^2}, \quad (1b)$$

$$E_b^{1D} = \frac{2e^4 m_{1D}}{\hbar^2 \epsilon^2} \ln^2 \left(\frac{a_B}{R} \right), \quad (1в)$$

где e — заряд электрона; ϵ — статическая диэлектрическая постоянная; m_{3D} , m_{2D} , m_{1D} — эффективные массы дырки в объеме, в плоскости квантовой ямы и вдоль оси квантовой проволоки соответственно; R — радиус

квантовой проволоки; $a_B = \hbar^2 \epsilon / m_{1D} e^2$ — эффективный боровский радиус.

Считается общепринятым, что при переходе от объемного материала к низкоразмерной структуре энергия связи водородоподобного комплекса растет за счет увеличения эффективности кулоновского взаимодействия [9]. Например, как видно из формул (1a)–(1в), если зона простая и, соответственно, эффективные массы носителей заряда в объемном материале, в плоскости квантовой ямы и вдоль оси квантовой проволоки равны $m_{3D} = m_{2D} = m_{1D}$, то энергия связи акцептора при переходе от объемного материала к двумерной системе увеличивается в 4 раза [9], а при переходе к квазиодномерной — логарифмически расходится [11,12]. При этом, так как увеличение энергии связи с усилением локализации при неизменной эффективной массе происходит только за счет увеличения эффективности кулоновского взаимодействия, энергия связи монотонным образом зависит от размера системы.

В наиболее распространенных полупроводниковых соединениях, в частности в системах III–V и II–VI с кубической симметрией, состояния вершины валентной зоны формируются из блоховских функций, обладающих полным моментом $3/2$. В объемных материалах эффективная масса дырок с проекциями момента $\pm 3/2$ на направление волнового вектора (зона тяжелых дырок) значительно превосходит массу состояний с проекциями $\pm 1/2$ (зона легких дырок).

Локализация дырки в квантовой яме или в квантовой проволоке приводит к уменьшению ее эффективной массы. Это в свою очередь приводит к уменьшению энергии связи акцептора. Таким образом, уменьшение размеров системы приводит к двум противоположным эффектам: усилению кулоновского взаимодействия, приводящему к росту энергии связи акцептора, и уменьшению эффективной массы, напротив, приводящему к ее уменьшению. Следовательно, при некоторых значениях параметров системы возможно появление немонотонной зависимости энергии связи акцептора от размеров структуры, а также уменьшение энергии связи акцептора в квантовой

[¶] E-mail: msemina@gmail.com

яме по сравнению с объемным материалом. Оценки по формулам (1а) и (1б) показывают, что, например, в InAs выполнено соотношение $E_b^{2D} < E_b^{3D}$, т.е. локализация в узкой по сравнению с размером объемного акцептора квантовой яме приводит к уменьшению энергии связи акцептора.

В данной работе проводится детальное исследование влияния локализации на энергию связи акцептора в рамках вариационного метода, учитывающего сложную структуру валентной зоны. Нами рассмотрены переходы от объемного материала к двумерной квантовой яме и к квантовой проволоке малого радиуса. Статья построена следующим образом: в разделе II описана модель, используемая в работе; затем в разделе III построены пробные функции, при помощи которых вычисляется энергия связи акцептора в зависимости от размера системы; в разделах IV и V приведены результаты расчета энергий связи в структурах с квантовыми ямами и проволоками соответственно, а также их обсуждение; основные результаты работы обобщены в Заключение.

2. Модель

Нами рассматриваются дырочные состояния, относящиеся к представлению Γ_8 точечной группы T_d (тяжелые и легкие дырки). Спин-орбитальное расщепление валентной зоны предполагается существенно большим, чем все остальные характерные энергии системы.

В граничных условиях мы не учитываем члены, приводящие к возможности смешивания тяжелых и легких дырок в квантовых ямах с резкой границей при нулевом волновом векторе дырки в плоскости квантовой ямы. Их учет не приводит к качественному и заметному количественному изменению результатов [13,14]. Зонные параметры и диэлектрическая постоянная полагаются одинаковыми внутри квантовой ямы или проволоки и вне ее. Считается, что акцептор расположен в центре квантовой ямы или на оси квантовой проволоки.

Состояния дырки, взаимодействующей с акцептором в квантовой яме (проволоке), описываются в рамках сферически-симметричного приближения для гамильтониана Латтинджера:

$$\hat{H} = \left(1 + \frac{5\gamma}{2\gamma_1}\right)k^2 - \frac{2\gamma}{\gamma_1}(\mathbf{k}\mathbf{J})^2 - \frac{2}{r} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}), \quad (2)$$

в который также включены кулоновское притяжение дырки к заряженному центру (член $-2/r$) и потенциал квантовой ямы (проволоки) $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$. Здесь \mathbf{r} — радиус-вектор дырки, $\gamma_1, \gamma \equiv \gamma_2 = \gamma_3$ — параметры Латтинджера, \mathbf{J} — оператор углового момента, отвечающий эффективному спину $3/2$, \mathbf{k} — оператор волнового вектора дырки, $\mathbf{k} = -i\partial/\partial\mathbf{r}$. В качестве единиц измерения энергии и длины используются эффективные Ридберг $Ry^* = m_0e^4/2\gamma_1\epsilon^2\hbar^2$ и боровский радиус $a_B^* = \hbar^2\gamma_1\epsilon/m_0e^2$, где m_0 — масса свободного электрона.

В работе будут рассмотрены два вида потенциала квантовой ямы (проволоки) $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$: параболический $V_1^{\text{well(wire)}}$ и прямоугольный с бесконечным барьером $V_2^{\text{well(wire)}}$ соответственно:

$$V_1^{\text{well}}(z) = \kappa z^2, \quad V_1^{\text{wire}}(\rho) = \kappa\rho^2, \quad (3)$$

$$V_2^{\text{well}}(z) = \begin{cases} 0, & |z| \leq \frac{L}{2}, \\ \infty, & |z| > \frac{L}{2}, \end{cases} \quad (4)$$

$$V_2^{\text{wire}}(\rho) = \begin{cases} 0, & \rho \leq R, \\ \infty, & \rho > R, \end{cases} \quad (5)$$

где z — координата вдоль оси роста квантовой ямы, ρ — координата в плоскости квантовой ямы и в поперечном сечении квантовой проволоки, κ — жесткость потенциала квантовой ямы (проволоки), L — ширина квантовой ямы, R — радиус квантовой проволоки. Считается, что ось роста квантовой ямы и ось квантовой проволоки направлены вдоль направления $z \parallel [001]$.

3. Пробная функция

Для построения пробной волновой функции для вычисления энергии связи дырки, локализованной на акцепторе, мы будем действовать согласно методу, развитому в работе [19]. Выделим противоположные предельные случаи, в которых общий вид волновой функции известен из физических соображений. В рассматриваемой задаче таких пределов два. Первым из них является случай, когда энергия размерного квантования одиночной дырки в квантовой яме или проволоке мала по сравнению с энергией связи объемного акцептора. Тогда структура волновой функции акцептора определяется в основном кулоновским взаимодействием дырки с заряженным центром. Второй предельный случай соответствует узкой квантовой яме или тонкой квантовой проволоке, когда характерная энергия размерного квантования дырки велика по сравнению с характерной энергией кулоновского взаимодействия. В этом пределе движение дырки определяется кулоновским взаимодействием лишь в тех направлениях, в которых движение носителей заряда свободно.

3.1. Предельный случай объемного акцептора

В предельном случае объемного материала $V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ волновая функция основного состояния акцептора имеет следующий вид [2]:

$$\Psi_{3D}(\mathbf{r}) = f(r)|L=0, J=3/2, F=3/2, F_z=\pm 3/2\rangle + g(r)|L=2, J=3/2, F=3/2, F_z=\pm 3/2\rangle, \quad (6)$$

где $f(r)$ и $g(r)$ — радиальные функции, которые необходимо определить из уравнения Шредингера с гамильтонианом (2) при $V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = 0$, и $|L, J, F, F_z\rangle$ обозначает угловую часть, имеющую орбитальный момент L ,

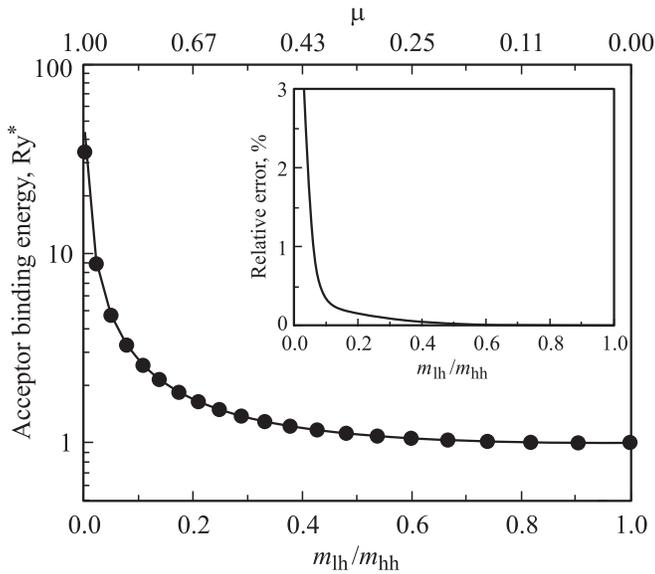


Рис. 1. Зависимость энергии связи объемного акцептора от отношения масс легкой и тяжелой дырок $m_{lh}/m_{hh} = (1 - \mu)/(1 + \mu)$, где $\mu = 2\gamma/\gamma_1$. Сплошная кривая и точки отвечают результатам вариационного и точного расчетов. Вставка показывает погрешность вариационного расчета. Энергия связи акцептора измеряется в эффективных Ридбергах: $Ry^* = m_0 e^4 / 2\gamma_1 \epsilon^2 \hbar^2$.

спин J , полный момент (сумму спина и орбитального момента) F и проекцию полного момента на ось z , F_z . Необходимо отметить, что состояния дырок четырехкратно вырождены по проекции спина F_z . Указанная функция (6) является точной в сферическом приближении [2,20]. В вариационном расчете используются нормированные функции, нормировочные константы в уравнении (6) и далее опускаются.

В данной работе функции $f(r)$ и $g(r)$ вычисляются при помощи вариационного метода, в качестве пробных волновых функций выбраны следующие:

$$f(r) = \exp(-\alpha_1 r), \quad g(r) = C_1 r \exp(-\alpha_2 r), \quad (7)$$

где C_1 и $\alpha_{1,2}$ — подгоночные параметры. Параметры $\alpha_{1,2}$ описывают притяжение дырок с различным орбитальным моментом L к заряженному центру, а параметр C_1 — долю состояния с моментом $L = 2$.

Оценим применимость выбранной пробной функции (7). Для этого мы сравним результаты вариационного расчета с пробной функцией (7) (сплошная кривая на рис. 1) и результаты „точного“ расчета, сделанного по методу, описанному в работе [2] с использованием базиса, состоящего из 80 элементов (точки на рис. 1). Энергия связи акцептора показана как функция отношения масс легкой и тяжелой дырки $\sigma = m_{lh}/m_{hh}$. Это отношение удобно выразить через параметр $\mu = 2\gamma/\gamma_1$, введенный в работе [2], который определяет энергию связи объемного акцептора в используемой модели:

$$\sigma = \frac{m_{lh}}{m_{hh}} = \frac{1 - \mu}{1 + \mu}. \quad (8)$$

Вставка к рис. 1 показывает относительную погрешность вариационного расчета энергии связи объемного акцептора. Из графика можно видеть, что точность выбранной пробной функции (7) весьма высокая: погрешность не превышает 3% в области физически разумных значений отношения масс дырок.

3.2. Акцептор в узкой квантовой яме

Волновая функция основного состояния акцептора в пределе строго двумерной квантовой ямы имеет определенное значение проекции спина дырки на ось роста и имеет следующий вид:

$$\Psi_{2D}(\mathbf{r}) = e^{-\rho/a_{2D}^*} \Psi_{0z}(z) |3/2\rangle, \quad (9)$$

где $\Psi_{0z}(z)$ — волновая функция основного состояния тяжелой дырки в потенциале квантовой ямы, $a_{2D}^* = a_B^*(\gamma_1 + \gamma)/2\gamma_1$ — двумерный эффективный боровский радиус для тяжелой дырки и $|3/2\rangle$ — волновая функция, отвечающая проекции спина $J_z = 3/2$ на ось роста квантовой ямы. Отметим, что в соответствии с теоремой Крамерса все состояния акцептора двукратно вырождены по проекции спина J_z . В дальнейшем мы будем рассматривать только одно из этих состояний.

Для параболической квантовой ямы (3) и для ямы с бесконечным барьером (4) волновые функции основного состояния поперечного квантования дырки имеют следующий вид [15]:

$$\Psi_{0z}(z) = e^{-\frac{\sqrt{\kappa}}{2} \left(\frac{\gamma_1}{\gamma_1 - 2\gamma}\right)^{1/2} z^2}, \quad (10)$$

$$\Psi_{0z}(z) = \begin{cases} \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right), & |z| \leq L/2, \\ 0, & |z| > L/2. \end{cases} \quad (11)$$

3.3. Акцептор в квантовой проволоке малого радиуса

В отличие от квантовой ямы, где для дырки, неподвижной в плоскости ямы, состояния с проекциями спина на ось роста $J_z = \pm 3/2$ и $J_z = \pm 1/2$ не смешиваются, в квантовой проволоке состояния с разными проекциями спина на ось системы смешиваются, даже если дырка неподвижна, т.е. при $k_z = 0$, где k_z — волновой вектор вдоль оси проволоки [16–18]. Поэтому при произвольном соотношении параметров Латтинджера γ_1 и γ волновая функция основного состояния акцептора в данном предельном случае должна определяться с учетом смешивания состояний.

В зависимости от параметров системы волновая функция основного состояния дырки в цилиндрически-симметричной квантовой проволоке может иметь одну из следующих форм [16–18]:

$$\Psi_{1D}^{(1)}(\rho, z) = C_3 \Psi_{-2\rho}^{(3/2)}(\rho) \psi_1(z) e^{-2i\varphi} |3/2\rangle + \Psi_{0\rho}^{(-1/2)}(\rho) \psi_2(z) | -1/2\rangle \quad (12)$$

или

$$\Psi_{1D}^{(2)}(\rho, z) = C_3 \Psi_{1\rho}^{(3/2)}(\rho) \psi_1(z) e^{-i\varphi|3/2} + \Psi_{1\rho}^{(-1/2)}(\rho) \psi_2(z) e^{+i\varphi|1/2}, \quad (13)$$

где φ — азимутальный угол радиус-вектора дырки, C_3 — подгоночный параметр, описывающий долю состояния с $J_z = 3/2$, $\psi_{1,2}(z)$ — волновые функции движения дырки с $J_z = 3/2$ и $J_z = 1/2$ вдоль оси квантовой проволоки. Отметим, что для свободной дырки $\psi_{1,2}(z) = e^{ik_{1,2}z}$, где $k_{1,2}$ — волновые вектора тяжелой и легкой дырок при заданной энергии. Волновые функции $\Psi_{m\rho}^{(J_z)}(\rho)$ есть волновые функции квантования дырки в плоскости поперечного сечения проволоки, которые отвечают низшему по энергии состоянию со значениями проекции спина на ось проволоки, J_z и углового момента m .

Отметим, что прямая диагонализация гамильтониана Латтинджера (2) в отсутствие потенциала акцептора, выполненная на базе из 50 элементов, показывает, что в параболической квантовой проволоке (3) при любых параметрах системы волновая функция основного состояния дырки имеет форму (12). В проволоках с бесконечным барьером при $\sigma \geq 0.075$ ($\mu \leq 0.86$) волновая функция основного состояния дырки также имеет форму (12), а при $\sigma > 0.075$ ($\mu > 0.86$) принимает форму (13).

Численный расчет также показывает, что, если волновая функция акцептора принимает форму (12), параметр C_3 оказывается малым, т.е. она в основном соответствует состоянию $1/2$. Если же волновая функция имеет вид (13), то оказывается $C_3 \approx 1$, что отвечает суперпозиции состояний $3/2$ и $1/2$ с угловыми моментами орбитальной части ∓ 1 .

Для параболической квантовой проволоки (3) волновые функции поперечного квантования дырки имеют следующий вид:

$$\Psi_{-2\rho}^{3/2}(\rho) = \rho^2 e^{-\frac{\sqrt{\kappa}}{2} \left(\frac{\gamma_1}{\gamma_1 + \gamma}\right)^{1/2} \rho^2},$$

$$\Psi_{0\rho}^{-1/2}(\rho) = e^{-\frac{\sqrt{\kappa}}{2} \left(\frac{\gamma_1}{\gamma_1 - \gamma}\right)^{1/2} \rho^2}. \quad (14)$$

В случае квантовой проволоки с бесконечным барьером (5) имеем:

$$\Psi_{-2\rho}^{3/2}(\rho) = \begin{cases} J_2\left(\frac{k_{20}}{R}\rho\right), & \rho \leq R, \\ 0, & \rho > R, \end{cases} \quad (15)$$

$$\Psi_{0\rho}^{-1/2}(\rho) = \begin{cases} J_0\left(\frac{k_{00}}{R}\rho\right), & \rho \leq R, \\ 0, & \rho > R, \end{cases}$$

$$\Psi_{-1\rho}^{3/2}(\rho) = \Psi_{1\rho}^{-1/2}(\rho) = \begin{cases} J_1\left(\frac{k_{10}}{R}\rho\right), & \rho \leq R, \\ 0, & \rho > R, \end{cases}$$

где k_{m0} — первый корень функции Бесселя $J_m(\rho)$.

Для дырки, локализованной на акцепторе, волновые функции $\psi_{1,2}(z)$, которые входят в состав функций (12) и (13) и в общем случае неизвестны, мы будем искать в виде

$$\psi_1(z) = e^{-\delta_1|z|}, \quad \psi_2(z) = e^{-\delta_2|z|}, \quad (16)$$

где $\delta_{1,2}$ — подгоночные параметры, характеризующие притяжение одномерной дырки к заряженному центру.

3.4. Построение пробной функции

Выше были рассмотрены физически различные предельные случаи, в которых вид волновой функции акцептора установлен из решения соответствующих уравнений Шредингера с меньшим числом переменных. Далее требуется построить функцию, которая при изменении подгоночных параметров переходит между формами, соответствующими предельным случаям объемного акцептора (6) и случаям узкой квантовой ямы (9) или проволоки малого радиуса (12)–(13).

В нашей задаче пробная функция — трехкомпонентная (как было сказано ранее, из двух вырожденных по проекции спина состояний учитывается только одно), соответственно каждая компонента должна плавно переходить между предельными формами.

Пробная функция для акцептора в квантовой яме выбирается в следующей форме:

$$\Psi_{\text{well}} = f_1(\mathbf{r}) \left| \frac{3}{2} \right\rangle + f_2(\mathbf{r}) \left| \frac{1}{2} \right\rangle + f_3(\mathbf{r}) \left| -\frac{1}{2} \right\rangle. \quad (17)$$

Функции $f_{1,2,3}(\mathbf{r})$ для квантовой ямы с параболическим потенциалом выбираются следующими:

$$f_1(\mathbf{r}) = e^{-\alpha_1 r - \beta_1 \rho - \delta_1 z^2} Y_{00}(\theta, \varphi) + \sqrt{\frac{1}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r - \beta_1 \rho - \delta_1 z^2} Y_{20}(\theta, \varphi),$$

$$f_2(\mathbf{r}) = -\sqrt{\frac{2}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r - \beta_2 \rho - \delta_2 z^2} Y_{21}(\theta, \varphi),$$

$$f_3(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r - \beta_2 \rho - \delta_2 z^2} Y_{22}(\theta, \varphi),$$

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — сферические функции; C_1 , $\alpha_{1,2}$, $\beta_{1,2}$, $\delta_{1,2}$ — подгоночные параметры. Внутри квантовой ямы с бесконечным барьером ($|z| \leq L/2$) пробные функции принимают вид

$$f_1(\mathbf{r}) = e^{-\alpha_1 r - \beta_1 \rho} \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) Y_{00}(\theta, \varphi) + \sqrt{\frac{1}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r - \beta_1 \rho} \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) Y_{20}(\theta, \varphi),$$

$$f_2(\mathbf{r}) = -\sqrt{\frac{2}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r - \beta_2 \rho} \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) Y_{21}(\theta, \varphi),$$

$$f_3(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r - \beta_2 \rho} \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) Y_{22}(\theta, \varphi),$$

где C_1 , $\alpha_{1,2}$, $\beta_{1,2}$ — подгоночные параметры. Здесь параметры $\alpha_{1,2}$ и $\beta_{1,2}$ характеризуют притяжение объем-

ной и двумерной дырок с проекциями спина 3/2 и 1/2 к центру, параметры $\delta_{1,2}$ описывают локализацию тяжелых и легких дырок в параболической квантовой яме, параметр C_1 характеризует смешивание состояний дырок с различным орбитальным моментом. Вне ямы с бесконечным прямоугольным потенциалом (4), при $|z| > L/2$, имеем $\Psi_{\text{well}} = 0$.

Таким образом, пробная функция (17) может принимать форму, соответствующую как случаю объемного акцептора ($\beta_{1,2} = 0, \delta_{1,2} = 0$), так и акцептора в узкой квантовой яме ($C_1 = 0, \alpha_{1,2} = 0$). Явный вид пробных функций аналогичен для бесконечного барьера и параболического потенциала. В случае системы с бесконечным барьером волновая функция поперечного движения фиксирована граничными условиями, а для параболического потенциала она является пробной, имеющей при этом форму, соответствующую волновой функции поперечного квантования дырки в предельном случае узких квантовых ям.

Аналогично, пробная функция для вычисления энергии связи основного состояния акцептора в квантовой проволоке имеет вид

$$\Psi_{\text{wire}} = g_1(\mathbf{r}) \left| \frac{3}{2} \right\rangle + g_2(\mathbf{r}) \left| \frac{1}{2} \right\rangle + g_3(\mathbf{r}) \left| -\frac{1}{2} \right\rangle. \quad (18)$$

В случае квантовой проволоки с параболическим потенциалом имеем

$$\begin{aligned} g_1(\mathbf{r}) &= e^{-\alpha_1 r} Y_{00}(\theta, \varphi) + \sqrt{\frac{1}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r} Y_{20}(\theta, \varphi) \\ &\quad + C_2 \rho^2 e^{-\beta_1 \rho^2 - \delta_1 |z| - 2i\varphi}, \\ g_2(\mathbf{r}) &= -\sqrt{\frac{2}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r} Y_{21}(\theta, \varphi), \\ g_3(\mathbf{r}) &= \sqrt{\frac{2}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r} Y_{22}(\theta, \varphi) + C_3 e^{\beta_2 \rho^2 - \delta_2 |z|}, \end{aligned}$$

где $C_{1,2,3}, \alpha_{1,2}, \beta_{1,2}$ и $\delta_{1,2}$ — подгоночные параметры.

Для квантовой проволоки с бесконечным барьером в случае $\sigma > 0.075$ ($\mu < 0.86$), т.е. когда акцептор в тонкой проволоке описывается функцией (12), внутри проволоки ($\rho \leq R$):

$$\begin{aligned} g_1(\mathbf{r}) &= e^{-\alpha_1 r} Y_{00}(\theta, \varphi) + \sqrt{\frac{1}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r} Y_{20}(\theta, \varphi) \\ &\quad + C_2 J_2 \left(\frac{k_{02\rho}}{R} \right) e^{-\delta_1 |z| - 2i\varphi}, \\ g_2(\mathbf{r}) &= -\sqrt{\frac{2}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r} Y_{21}(\theta, \varphi), \\ g_3(\mathbf{r}) &= \sqrt{\frac{2}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r} Y_{22}(\theta, \varphi) + C_3 J_0 \left(\frac{k_{00\rho}}{R} \right) e^{-\delta_2 |z|}, \end{aligned}$$

а в случае $\sigma < 0.075$ ($\mu > 0.86$), когда акцептор в тонкой проволоке описывается функцией (13), при $\rho \leq R$:

$$\begin{aligned} g_1(\mathbf{r}) &= e^{-\alpha_1 r} Y_{00}(\theta, \varphi) + \sqrt{\frac{1}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r} Y_{20}(\theta, \varphi) \\ &\quad + C_2 J_1 \left(\frac{k_{01\rho}}{R} \right) e^{-\delta_1 |z| - i\varphi}, \\ g_2(\mathbf{r}) &= -\sqrt{\frac{2}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r} Y_{21}(\theta, \varphi), \\ g_3(\mathbf{r}) &= \sqrt{\frac{2}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r} Y_{22}(\theta, \varphi) + C_3 J_1 \left(\frac{k_{01\rho}}{R} \right) e^{-\delta_2 |z| + i\varphi}, \end{aligned}$$

где $C_{1,2,3}, \alpha_{1,2}$ и $\delta_{1,2}$ — подгоночные параметры. Здесь $\alpha_{1,2}$ и $\delta_{1,2}$ описывают притяжение объемной и одномерной дырки с проекциями спина 3/2 и 1/2 к центру, $\beta_{1,2}$ характеризует локализацию тяжелых и легких дырок в поперечном сечении квантовой проволоки, C_1 описывает смешивание состояний объемных дырок с различным орбитальным моментом, $C_{2,3}$ характеризуют долю состояний одномерных дырок с проекциями момента 3/2 и 1/2 на ось проволоки. Вне квантовой проволоки с бесконечным потенциалом (5), при $\rho > R$ имеем $\Psi_{\text{wire}} = 0$.

Функция (18) принимает форму, соответствующую случаю как объемного акцептора ($C_{3,4} = 0$), так и акцептора в квантовой проволоке малого радиуса ($C_2 = 0, C_{3,4} \rightarrow \infty$). Отметим, что введением дополнительных подгоночных параметров можно объединить пробные функции, соответствующие формам (12) и (13), однако это не приводит к существенному росту точности расчета.

Таким образом, были построены пробные функции для вычисления энергии связи основного состояния акцептора в квантовой яме и в квантовой проволоке, учитывающие особенности строения сложной валентной зоны. Предложенные функции содержат небольшое число физически осмысленных подгоночных параметров и позволяют проследить переход от объемного материала к узкой квантовой яме или квантовой проволоке малого радиуса. Далее представлены результаты вариационных расчетов и их обсуждение.

4. Энергия связи акцептора в квантовой яме

Напомним, что энергией связи акцептора называется разность энергий основных состояний акцептора (E_A) и одиночной дырки, помещенной в тот же внешний потенциал (E_h):

$$E_b = E_A - E_h. \quad (19)$$

Если пренебречь смешиванием состояний дырки с различными значениями проекции спина на ось роста квантовой ямы, то в пределе очень узких квантовых ям масса тяжелой дырки в плоскости ямы задается

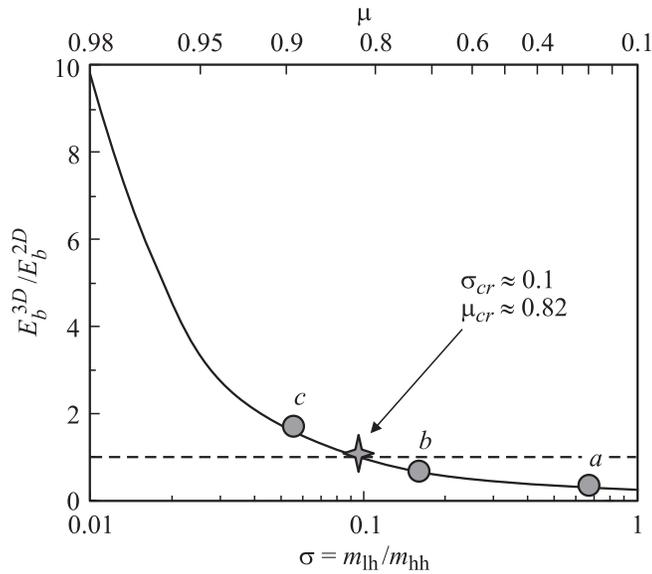


Рис. 2. Отношение предельных значений энергии связи объемного E_b^{3D} и двумерного E_b^{2D} акцептора в зависимости от отношения эффективных масс легкой и тяжелой дырок в объемном материале σ . Точки a , b и c соответствуют значениям σ , использованным в расчете.

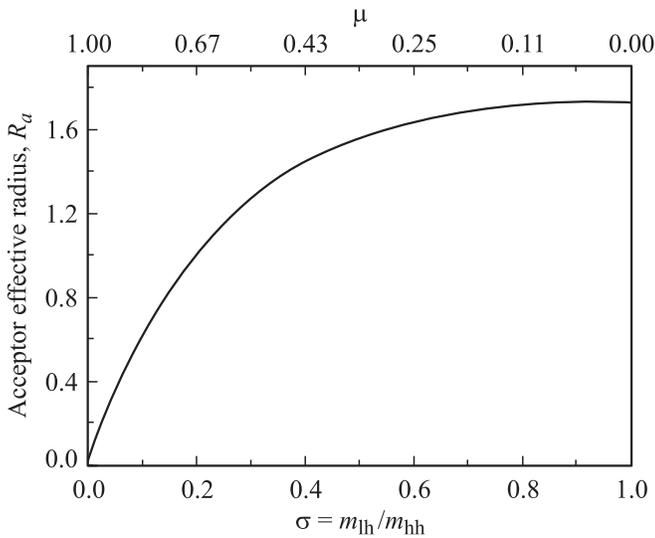


Рис. 3. Зависимость характерного размера объемного акцептора R_a от отношения масс легкой и тяжелой дырок $\sigma = m_{lh}/m_{hh}$.

выражением $m_{2D} = m_0/(\gamma_1 + \gamma)$. Тогда энергия связи акцептора может быть вычислена аналитически согласно уравнению (16):

$$E_b = \frac{8 Ry^*}{2 + \mu} = \frac{8 Ry^*(1 + \sigma)}{3 + \sigma}. \quad (20)$$

На рис. 2 показано отношение предельных значений энергий связи акцептора в узких квантовых ямах (E_b^{2D}) и в объемном материале (E_b^{3D}) в зависимости от отношения масс легкой и тяжелой дырок $\sigma = m_{lh}/m_{hh}$.

Вариационные расчеты энергии связи акцептора были выполнены при трех различных значениях параметра σ : 0.67, 0.14 (соответствует GaAs) и 0.052 (соответствует InAs) (параметр $\mu = 0.2, 0.75$ и 0.9). Эти значения выделены как (a) , (b) и (c) на рис. 2. Из рисунка видно, при малом отношении масс $\sigma < \sigma_{cr} \approx 0.1$ энергия связи акцептора в квантовой яме меньше, чем в объемном материале.

Локализация в квантовой яме начинает заметным образом менять структуру акцептора, когда ширина ямы становится сравнима или меньше характерного размера волновой функции объемного акцептора R_a . Определим его как среднеквадратичный размер волновой функции водородоподобного комплекса с соответствующей энергией связи в рамках модели простой зоны:

$$R_a = \frac{\sqrt{3}}{E_b^{3D}}.$$

Зависимость R_a от отношения масс легкой и тяжелой дырки представлена на рис. 3.

На рис. 4 показаны зависимости энергии связи акцептора от эффективной ширины квантовой ямы, вычисленные для разных отношений масс тяжелой и легкой дырки для квантовых ям с параболическим (3) и прямоугольным бесконечным потенциалом (4). На графике

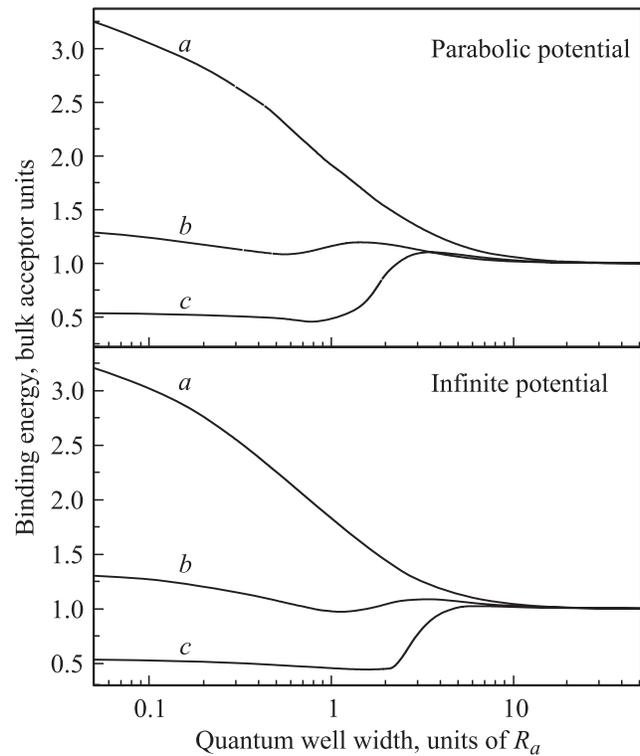


Рис. 4. Энергия связи акцептора как функция эффективной ширины квантовой ямы для параболического и прямоугольного бесконечного потенциала. Кривые a , b и c соответствуют различным отношениям масс легкой и тяжелой дырки σ : 0.67, 0.14, 0.052 соответственно.

в качестве единицы измерения энергии выбрана энергия объемного акцептора при соответствующем значении σ (рис. 1). В качестве единицы измерения ширины ямы выбран характерный размер волновой функции объемного акцептора R_a при том же отношении масс (рис. 3).

В случае квантовой ямы с параболическим потенциалом $V_1^{\text{well}}(z) = \kappa z^2$ эффективная ширина ямы L_{eff} связана с жесткостью ее потенциала κ следующим соотношением:

$$L_{\text{eff}} = \pi \sqrt[4]{\frac{1-\mu}{\kappa}} = \pi \sqrt[4]{\frac{2\sigma}{\kappa}}.$$

Здесь L_{eff} определяется как ширина квантовой ямы с бесконечными стенками, в которой дырка имеет такую же энергию размерного квантования.

Если значение параметра σ близко к 1 (кривые (a) на верхней и нижней панелях рис. 4), то влияние сложной структуры валентной зоны незначительно и изменение эффективной массы дырки за счет ее локализации в квантовой яме мало, основную роль в изменении энергии связи акцептора играет увеличение эффективности кулоновского взаимодействия. В этом случае происходит монотонное увеличение энергии связи акцептора при уменьшении эффективной ширины квантовой ямы. С уменьшением величины σ зависимость энергии связи акцептора от ширины квантовой ямы становится немонотонной, это связано с усилением влияния сложной структуры валентной зоны и более существенным изменением эффективной массы при переходе между объемным материалом и двумерной квантовой ямой (рис. 4, кривые b). Немонотонное поведение энергии связи акцептора как функции эффективной ширины квантовой ямы становится наиболее выраженным при $\sigma > \sigma_{\text{cr}} \approx 0.1$, когда энергия связи акцептора в идеальной двумерной квантовой яме меньше, чем в объемном материале (рис. 4, кривые c). Немонотонное поведение энергии связи акцептора и даже ее уменьшение по сравнению с объемным материалом может наблюдаться в структурах на основе InAs.

Нами был также выполнен вариационный расчет с использованием пробных функций вида (17) при учете гофрировки изоэнергетических поверхностей, т.е. с учетом дополнительного вклада в гамильтониан Латтинджера, равного

$$\hat{H}_1 = \frac{\gamma_2 - \gamma_3}{\gamma_1} \sum_{i' \neq i} (J_{i'} J_i + J_i J_{i'}) k_{i'} k_i.$$

Расчет показал, что поведение энергий связи качественно аналогично представленному на рис. 3, имеются лишь количественные отличия, не превышающие 8% в случае GaAs. Эти отличия связаны в основном с тем, что учет гофрировки приводит к изменению значения энергии акцептора в двумерном случае по сравнению с изотропным приближением.

Необходимо обратить внимание на то, что различия между соответствующими кривыми для моделей

параболического и прямоугольного потенциалов очень малы в предельных случаях, т.е. вдали от переходной области, где возможно проявление немонотонности. Различия существенны лишь непосредственно в области немонотонной зависимости, которая имеет место при несколько разной ширине ямы, и носят количественный характер. Это свидетельствует об универсальном характере зависимостей, приведенных в одинаковых единицах измерения.

5. Энергия связи акцептора в квантовой проволоке

Выше мы продемонстрировали, что немонотонность зависимости энергии связи акцептора от ширины квантовой ямы связана с перестройкой дырочных состояний и уменьшением эффективной массы движения дырки в плоскости при уменьшении ширины ямы. Иная ситуация наблюдается при переходе от объемного материала к квазиодномерной системе — квантовой проволоке. Основное состояние свободной дырки в такой системе является смесью состояний с проекциями спина на ось структуры $\pm 1/2$ и $\pm 3/2$, причем основной вклад вносят состояния с проекцией спина $\pm 1/2$. Это приводит к тому, что изменение эффективной массы при уменьшении радиуса проволоки может оказываться менее существенным, чем для квантовых ям. Вторым важным отличием квазиодномерных систем является отсутствие предельного значения для энергии связи акцептора, соответствующего проволоке нулевого радиуса. При уменьшении радиуса квантовой проволоки энергия связи акцептора логарифмически расходится [11,12]. Оба указанных обстоятельства позволяют ожидать, что немонотонность зависимости энергии связи от размера системы будет заметно меньше в структурах с квантовыми проволоками, чем с квантовыми ямами.

На рис. 5 представлены зависимости энергии связи акцептора от эффективного радиуса квантовой проволоки с параболическим (3) и прямоугольным потенциалом с бесконечным барьером (5), вычисленные для тех же величин отношения масс легких и тяжелых дырок σ , что и для квантовой ямы (рис. 3). Так же как и для квантовых ям, в качестве единиц измерения энергии и радиуса проволоки на рис. 5 выбраны энергия связи E_b^{3D} и характерный радиус R_a акцептора в объемном материале с соответствующим значением σ . Аналогично случаю параболических квантовых ям, для параболической квантовой проволоки с потенциалом $V_1^{\text{wire}}(\rho) = \kappa \rho^2$ ее эффективный радиус R_{eff} связан с жесткостью потенциала κ соотношением

$$R_{\text{eff}} = \frac{k_{00}}{\sqrt{2}} \sqrt[4]{\frac{2-\mu}{2\kappa}} = \frac{k_{00}}{\sqrt{2}} \sqrt[4]{\frac{1+3\sigma}{2\kappa}}.$$

Здесь R_{eff} — радиус квантовой проволоки с бесконечным барьером в модели простой зоны, в которой энергия

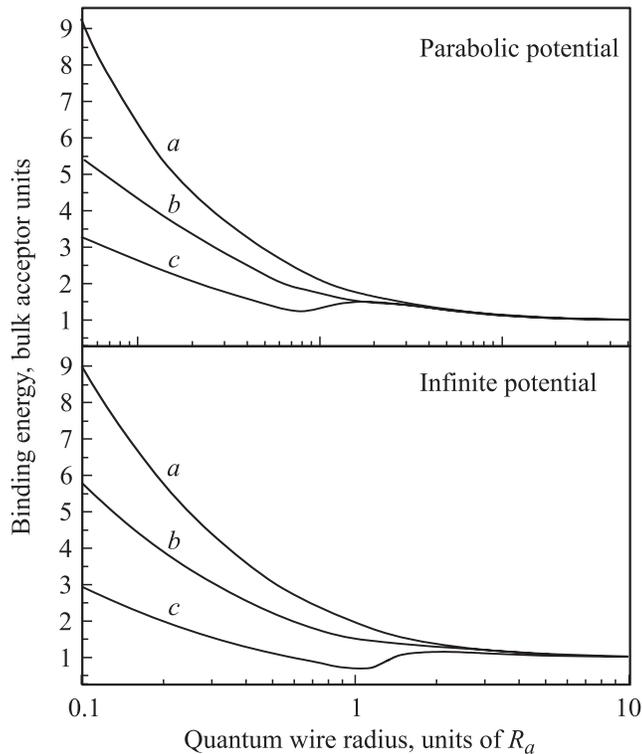


Рис. 5. Энергия связи акцептора как функция радиуса квантовой проволоки для параболического и прямоугольного бесконечного потенциалов. Кривые *a*, *b* и *c* соответствуют различным величинам отношения масс легкой и тяжелой дырки: $\sigma = 0.67, 0.14, 0.052$, использованным в расчете для квантовой ямы.

размерного квантования дырки такая же, как и в параболической проволоке.

Рис. 5 показывает значительное ослабление немонотонности в зависимости энергии связи акцептора от радиуса квантовой проволоки. Кривая *b* теперь демонстрирует монотонную зависимость от эффективного радиуса квантовой проволоки, а немонотонность кривой *c* выражена значительно слабее, чем в случае квантовых ям. Отметим также, что, как и для систем с квантовыми ямами, имеется хорошее согласие между результатами расчетов для двух разных потенциалов квантовой проволоки, что обусловлено универсальным характером рассчитанных зависимостей.

6. Заключение

В заключение отметим, что в данной работе нами развит вариационный метод для нахождения волновых функций и энергий связи кулоновских комплексов с учетом сложной структуры зон. Выполнены расчеты энергии связи нейтральной акцепторной примеси в квантовых ямах и в квантовых проволоках в рамках гамильтониана Латтинджера для состояний валентной зоны. Построенные пробные функции имеют ясный

физический смысл, небольшое число вариационных параметров и плавно переходят между формами, отвечающими предельным случаям, при изменении подгоночных параметров.

Мы продемонстрировали, что при переходе от объемного акцептора к двумерному или одномерному пределу не только существенно меняется величина кулоновского притяжения дырки к примеси, но и происходит перестройка структуры акцептора. Изменение структуры связано с особенностями сложной зоны и может быть интерпретировано как изменение эффективной массы носителя с шириной ямы или радиусом проволоки. Указанная перестройка акцептора приводит к появлению немонотонной зависимости его энергии связи от ширины ямы или радиуса проволоки и даже понижения энергии связи акцепторной примеси в узкой квантовой яме по сравнению с объемным материалом.

Авторы благодарны РФФИ, грант № 11-02-00573-а, и программе президиума РАН „Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов“ за финансовую поддержку, а также М.М. Глазову за полезные обсуждения.

Список литературы

- [1] W. Kohn, D. Schechter. *Phys. Rev.*, **99**, 1903 (1955).
- [2] A. Baldereschi, N.O. Lipari. *Phys. Rev. B*, **8**, 2697 (1973).
- [3] A. Baldereschi, N.O. Lipari. *Phys. Rev. B*, **9**, 1525 (1974).
- [4] Ш.М. Коган, А.Ф. Полупанов. *ЖЭТФ*, **80**, 394 (1981).
- [5] Н.С. Аверкиев, А.В. Родина. *ФТТ*, **35**, 1051 (1993).
- [6] И.А. Меркулов, А.В. Родина. *ФТП*, **28**, 2, 321 (1994).
- [7] R.C. Miller, A.C. Gossard, W.T. Tsang, O. Munteanu. *Phys. Rev. B*, **25**, 3871 (1982).
- [8] Q.X. Zhao, S. Wongmanerod, M. Willander, P.O. Holtz, S.M. Wang, M. Sadeghi. *Phys. Rev. B*, **63**, 195 317 (2001).
- [9] E.L. Ivchenko, G.E. Pikus. *Superlattices and other heterostructures*. 2nd edn (Springer Verlag, Berlin, 1997).
- [10] J.H. Davies. *The physics of low-dimensional semiconductors: An introduction* (Cambridge University Press, Cambridge UK, 1998).
- [11] R. Loudon. *Am. J. Phys.*, **27**, 649 (1959).
- [12] М.А. Семина, Р.А. Сергеев, Р.А. Сурис. *ФТП*, **42** (12), 1459 (2008).
- [13] I.L. Aleiner, E.L. Ivchenko. *Письма ЖЭТФ*, **55**, 692 (1992).
- [14] E.L. Ivchenko, A.Yu. Kaminski, U. Roessler. *Phys. Rev. B*, **54**, 5852 (1996).
- [15] И.А. Меркулов, В.И. Перель, М.Е. Портной. *ЖЭТФ*, **99**, 1202 (1990).
- [16] M. Sweeny, J. Xu, M. Shur. *Superlat. Microstruct.*, **4**, 623 (1988).
- [17] P.C. Sercel, P.J. Vahala. *Phys. Rev. B*, **42**, 3690 (1990).
- [18] D. Csontos, P. Brusheim, U. Zülicke, H.Q. Xu. *Phys. Rev. B*, **79**, 155 323 (2009).
- [19] М.А. Семина, Р.А. Сергеев, Р.А. Сурис. *ФТП*, **40** (11), 1373 (2006).
- [20] A.V. Efanov. *Semicond. Sci. Technol.*, **24**, 035 017 (2009).

Редактор Л.В. Беляков

Influence of the localization in quantum wells and quantum wires on the heavy and light hole mixing and on the acceptor binding energy

M.A. Semina, R.A. Suris

Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract The effect of the localization in the quantum well or wire on the heavy and light hole mixing and on the binding energy of the acceptor is studied within the framework of the variational method. The trial functions, allowing to trace the transition between the bulk material and thin quantum wells or quantum wires of the small radius, are constructed. The possibility of the non-monotonous dependence of the acceptor binding energy on the quantum well thickness and the quantum wire radius is demonstrated.