

ЕНЕРГІЯ ЗВ'ЯЗКУ ОСНОВНОГО СТАНУ ВОДНЕВОПОДІБНОЇ ДОМІШКИ ПРИ НАЯВНОСТІ МАГНІТНОГО ПОЛЯ, ЛОКАЛІЗОВАНОЇ В КВАНТОВОМУ ДРОТІ

Проведено розрахунок енергії зв'язку водневоподібної домішки в циліндричному квантовому дроті для нескінченного потенціального бар'єра при наявності однорідного магнітного поля, прикладеного вздовж осі дроту. Розрахунок проводився з використанням варіаційної хвильової функції, в якій враховувалося обмеження з боку дроту, вплив кулонівського притягання між домішковим іоном і електроном. Досліджено зміну енергії зв'язку водневоподібної домішки зі зміною радіуса циліндричного квантового дроту і величини індукції магнітного поля.

There was calculated the energy of hydrogenlike impurity link in cylindric quantum wire for infinite potential boundary in homogeneous magnetic field applied along the axis of the wire. The calculation was performed using the variative wave function, where the restriction from the wire's side and Coulomb attraction between impuritive ion and electron were taken into consideration. The change of energy of hydrogenlike impurity link with respect to the change of the cylindric quantum wire radius and the value of magnetic field induction were investigated.

Низькорозмірні квантові структури стали елементною базою для різного роду електронних і оптоелектронних пристроїв. Інтерес до цих систем викликаний тим, що електричні, кінетичні та оптичні властивості в них поліпшуються в порівнянні з їх об'ємними аналогами. Виявлено, що фізичні властивості сильно поліпшуються при пониженні розмірності від двовимірних до одновимірних квантових дротів. За останні кілька років на основі методу молекулярно-променевої епітаксії створені та експериментально вивчаються квантові дроти [1-6], їх кінетичні, електричні і оптичні властивості.

Розуміння фізики домішкових станів у напівпровідникових квантових структурах є важливе завдання фізики напівпровідників з багатьох причин: зменшення розмірності квантового дроту (КД) може контролюватись зміною радіуса дроту. Електрон, зв'язаний із домішкою, яка знаходиться в центрі дроту, ніколи не "побачить" поверхні в досить широких КД, тобто він поводитиметься так, як і у випадку тривимірного простору. Для проміжного радіуса КД (близького до борівського радіуса електрона) вплив потенціальної ями на електрон може бути сумірним із впливом домішкового центра і поведінка електрона буде квазіодновимірною. Для дуже тонких КД потенціальна яма скінченної глибини не може ефективно об-

межити рух електрона і він поводить себе як тривимірний. Для нескінченно глибокої потенціальної ями електрон, зв'язаний із домішкою всередині КД, буде сильніше притягуватися до неї, ніж у випадку об'ємного матеріалу. Більше того, добре відомо, що при пониженні розмірності збільшується ефективна величина кулонівської взаємодії. Енергія зв'язку основного стану водневоподібної домішки E_B в D -розмірностях дається формулою

$$E_B = \frac{2}{D-1} R_B \frac{\mu}{\epsilon_0},$$

де R_B – константа Рідберга, μ – ефективна маса, ϵ_0 – діелектрична проникність. При прямуванні D до 1 енергія зв'язку прямує до нескінченності [7].

В останні роки проводились інтенсивні дослідження поведінки мілких домішкових рівнів в об'ємних напівпровідниках та наногетероструктурах на їх основі в присутності магнітного поля. Накладання зовнішнього магнітного поля видозмінює симетрію цих станів та їх хвильові функції. Вивчення переходів між енергетичними рівнями домішки приводить до визначення енергії зв'язку, сили осциляторів, а також інших характеристик цих рівнів. Поведінка домішкових рівнів при наявності зовнішнього магнітного поля в наногетеросистемах вивчена ще не достатньо. Зауважимо, що при наявності магнітного поля в

таких низькорозмірних системах спостерігаються квантові осциляції магнетоопору – так званий квантовий ефект Холла.

Мета даної роботи – обчислення енергії зв'язку основного стану водневоподібної домішки, локалізованої в центрі квантового дроту, при наявності магнітного поля, що прикладене вздовж осі дроту, для нескінченно глибокої потенціальної ями.

Гамільтоніан системи складається з потенціальної енергії взаємодії електрона з домішкою, потенціала ями $V(\rho)$, радіус якої R , а також доданку, що враховує наявність магнітного поля, напрямленого вздовж осі Oz – паралельно до осі дроту:

$$H = \frac{\left(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2}{2\mu} - \frac{e^2}{\varepsilon_0|\vec{r} - \vec{r}_0|} + V(\rho), \quad (1)$$

тут

$$|\vec{r} - \vec{r}_0| = \left[\rho^2 + \rho_0^2 - 2\rho\rho_0 \cos(\varphi - \varphi_0) + z^2\right]^{\frac{1}{2}},$$

ε_0 – діелектрична константа матеріалу GaAs, що знаходиться всередині КД, μ – ефективна маса електрона, \vec{r}_0 – положення домішкового атома, $\vec{A}(\vec{r})$ – векторний потенціал магнітного поля, $V(\rho)$ – потенціал ями.

Для випадку нескінченної глибокої ями $V(\rho)$ має вигляд:

$$V(\rho) = \begin{cases} 0, & 0 \leq \rho \leq R, \\ \infty, & \rho > R. \end{cases} \quad (2)$$

Для домішки, розміщеної на осі КД, потрібно поставити $\rho_0=0$. Для однорідного магнітного поля

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{2}[\vec{H} \times \vec{r}],$$

де $\vec{H} = H\vec{k}$. У циліндричних координатах компоненти вектор-потенціалу для даної конфігурації магнітного поля мають вигляд:

$$A_\rho = A_z = 0, \quad A_\varphi = \frac{1}{2}H\rho.$$

Включення домішкового потенціалу приводить до того, що змінні в диференціальному рівнянні Шредінгера не розділяються. Тому для знаходження енергії зв'язку основного стану електрона використовуватимемо варіаційний метод, основним завданням якого є коректна побудова варіаційної хвильової функції для основного стану. Для цього спочатку розв'язується задача Шредінгера для потенціальної ями нескінченної глибини при наявності магнітного поля.

Гамільтоніан електрона має вигляд:

$$H = \frac{\left(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2}{2\mu} + V(\rho), \quad (3)$$

або
$$H = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{e}{c} \frac{\vec{A}p}{\mu} + \frac{e^2 \vec{A}^2}{2\mu c^2} + V(\rho). \quad (4)$$

Ввівши циклотронну частоту $\omega_0 = \frac{|e|H}{c\mu_0}$, де μ_0 – маса електрона у вакуумі, гамільтоніан системи (4) запишемо у вигляді:

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{\mu_0}{\mu} \frac{\hbar\omega_0}{2i} \frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\mu_0^2\omega_0^2\rho^2}{8\mu} + V(\rho). \quad (5)$$

Для визначення енергетичного спектра та хвильової функції електрона необхідно розв'язати стаціонарне рівняння Шредінгера

$$H\Psi(\rho, \varphi, z) = E\Psi(\rho, \varphi, z). \quad (6)$$

В циліндричній системі координат оператор Гамільтона (5) матиме вигляд:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial\rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial\rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + \frac{\mu_0}{\mu} \frac{\hbar\omega_0}{2i} \frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\mu_0^2\omega_0^2}{8\mu} \rho^2 + V(\rho). \quad (7)$$

Оператори $L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\varphi}$ і $p_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$ комутують між собою, а також із гамільтоніаном (7), тому для цих операторів існує спільна система хвильових функцій:

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \exp[i(m\varphi + k_z z)] f(\rho). \quad (8)$$

Тут L – довжина основної області квантового дроту ($L \gg R$), $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$ – магнітне квантове число, k_z – квазіімпульс електрона при русі вздовж осі дроту Oz .

Радіальна частина $f(\rho)$ хвильової функції задовольняє рівняння

$$\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} f(\rho) + \left[-\frac{m}{\rho} - \frac{\mu_0\omega_0 m}{\hbar} - \frac{\mu_0^2\omega_0^2\rho^2}{4\hbar^2} - \frac{2\mu[V(\rho) - E_\perp]}{\hbar^2} \right] f(\rho) = 0, \quad (9)$$

де E_\perp – енергія "поперечного" руху електрона. Енергетичний спектр електрона набуває вигляду

$$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2\mu} + E_{\perp}. \quad (10)$$

Зробивши заміну змінної $\xi = \frac{\rho^2}{2a^2}$ в (9), де

$$a = \sqrt{\frac{\hbar c}{|e|H}} - \text{циклотронний радіус, і врахувавши,}$$

що $V(\rho)=0$ при $\rho \leq R$, отримаємо нове рівняння, яке задовольняє радіальна частина хвильової функції

$$\frac{d^2 f}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{df}{d\xi} + \left[-\frac{m}{4\xi^2} - \frac{1}{4} + \frac{k^2 a^2}{2\xi} - \frac{m}{2\xi} \right] f(\xi) = 0, \quad (11)$$

де $k^2 = \frac{2\mu E_{\perp}}{\hbar^2}$.

Розв'язок (11) шукається у вигляді:

$$f(\xi) = \xi^{\frac{|m|}{2}} \exp\left(-\frac{\xi}{2}\right) W(\xi). \quad (12)$$

Функція $W(\xi)$ задовольнятиме наступне рівняння

$$\xi W''(\xi) + [m+1-\xi] W'(\xi) - \frac{1}{2} [m+1+|m|-k^2 a^2] W(\xi) = 0. \quad (13)$$

Останнє рівняння – диференціальне рівняння Кумера

$$z \frac{d^2 \Phi}{dz^2} + (c-z) \frac{d\Phi}{dz} - b\Phi = 0, \quad (14)$$

розв'язок якого є суперпозицією функцій Кумера першого та другого роду:

$$\Phi(z) = AF(b, c, z) + BU(b, c, z). \quad (15)$$

Щоб хвильова функція електрона була регулярною функцією в центрі потенціальної ями, необхідно поставити $B=0$.

Порівнюючи рівняння (13) та (14), запишемо вирази для аргументів b, c функції Кумера:

$$b = \frac{1}{2}(m+1+|m|-k^2 a^2), \quad c = |m|+1.$$

Функцію $W(\xi)$ подамо у вигляді

$$W(\xi) = AF\left(-\frac{k^2 a^2}{2} + \frac{m}{2} + \frac{1}{2} + \frac{|m|}{2}, |m|+1, \xi\right),$$

тоді функція $f(\xi)$ визначатиметься співвідношенням

$$f(\xi) = A \exp\left(-\frac{\xi}{2}\right) \xi^{\frac{|m|}{2}} \times \\ \times F\left(-\frac{k^2 a^2}{2} + \frac{m}{2} + \frac{1}{2} + \frac{|m|}{2}, |m|+1, \xi\right). \quad (16)$$

Константу інтегрування A знайдемо з умови нормування хвильової функції (16):

$$A^{-2} = a^2 \int_0^{\xi_R} d\xi \exp(-\xi) \xi^{|m|} \times \\ \times F^2\left(-\frac{k^2 a^2}{2} + \frac{m}{2} + \frac{1}{2} + \frac{|m|}{2}, |m|+1, \xi\right),$$

де $\xi_R = \frac{R^2}{2a^2}$.

Позначимо $\frac{k^2 a^2}{2} + \frac{m}{2} + \frac{1}{2} + \frac{|m|}{2} = a_{|m|l}$ і, використовуючи зв'язок між E_{\perp} та k , а також $a_{|m|l}$ і k , отримаємо вираз для E_{\perp} :

$$E_{\perp} = \hbar\omega_0 \left(a_{|m|l} + \frac{m}{2} + \frac{1}{2} + \frac{|m|}{2} \right), \quad (17)$$

$l=1, 2, 3, \dots$ нумерує нулі функції

$$F\left(-\frac{k^2 a^2}{2} + \frac{m}{2} + \frac{1}{2} + \frac{|m|}{2}, |m|+1, \xi_R\right)$$

при заданому m .

Величину $a_{|m|l}$ знайдемо з граничної умови $f(\xi) \big|_{\xi=R} = 0$, звідки випливає, що

$$F(-a_{|m|l}, |m|+1, \xi_R) = 0.$$

Беручи до уваги вигляд функції (16), для нескінченно глибокої потенціальної ями при наявності магнітного поля для основного стану електрона, який взаємодіє з домішкою, варіаційна хвильова функція має вигляд:

$$\Psi\left(\vec{r}\right) = \begin{cases} N \exp\left(-\frac{\xi}{2}\right) F(-a_{01}, 1, \xi) \times \\ \times \exp\left[-\lambda(\rho^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}\right], & 0 \leq \rho \leq R, \\ 0, & \rho > R, \end{cases} \quad (18)$$

N – нормуючий множник.

Хвильова функція (18) задовольняє граничну умову $\Psi(\rho=R)=0$, a_{01} визначає енергію основного стану задачі. N визначається з рівняння

$$N^{-2} = -2\pi \frac{dB}{d\lambda},$$

де $B = \int_0^R d\rho \rho \exp\left(-\frac{\rho^2}{2a}\right) F^2\left(-a_{01}, 1, \frac{\rho^2}{2a}\right) K_0(2\lambda\rho),$

$K_0(2\lambda\rho)$ – модифікована функція Бесселя другого роду нульового порядку.

Енергія зв'язку $E_B(R, H)$ водневоподібної до-

мішки визначалася як енергія основного стану системи у відсутності кулонівської взаємодії мінус енергія основного стану $\langle \hat{H}(R,H) \rangle$ у присутності кулонівської взаємодії:

$$E_B(R, H) = \hbar\omega_0(a_{01} + \frac{1}{2}) - \langle (R,H) \rangle.$$

Енергія основного стану

$$\langle (R,H) \rangle = \langle T(R,H) \rangle + \langle V(R,H) \rangle.$$

Вирази для квантовомеханічних середніх від кінетичної і потенціальної енергії даються співвідношеннями:

$$\langle T \rangle = \hbar\omega_0(a_{01} + \frac{1}{2}) + \frac{\hbar^2}{2\mu}\lambda^2, \quad \langle V \rangle = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon_0} N^2 B;$$

$$E_B(R, H) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\lambda^2 - \frac{2e^2}{\epsilon_0} \frac{B}{dB/d\lambda}.$$

За допомогою варіаційного методу розрахована енергія зв'язку для домішкового іона, який знаходиться на осі циліндра в присутності однорідного магнітного поля, прикладеного вздовж осі дроту. Отримані магнетопольова та радіальна залежності енергії зв'язку електрона. Числовий розрахунок проводився для GaAs із параметрами $\mu=0,067\mu_0$, $\epsilon_0=12,5$.

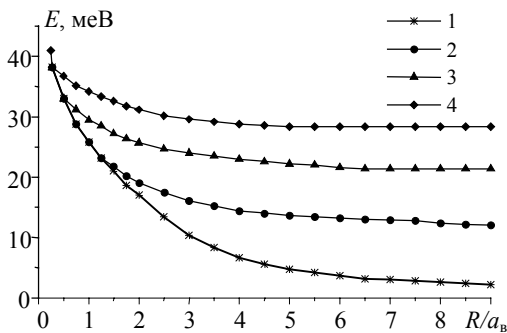


Рис.1. Графіки залежності енергії зв'язку електрона для різних значень магнітного поля від радіуса дроту: $H=0$ (1), $H=100$ кГс (2), $H=200$ кГс (3), $H=400$ кГс (4).

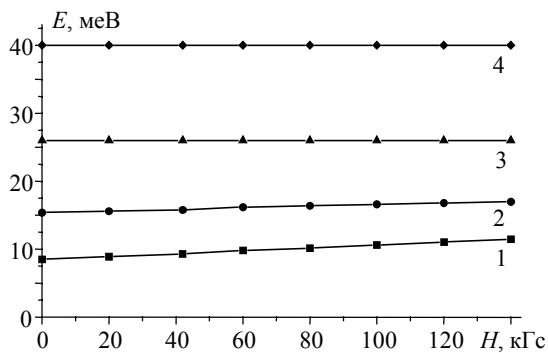


Рис.2. Графіки залежності енергії зв'язку електрона для різних значень радіуса КД від магнітного поля: $R/a_B=10$ (1), $R/a_B=2$ (2), $R/a_B=1$ (3), $R/a_B=0,5$ (4).

У випадку нескінченно глибокої потенціальної ями при зменшенні радіуса циліндра енергія зв'язку прямує до нескінченності (рис.1). На рис.1 зображено залежності енергії зв'язку електрона для різних значень напруженості магнітного поля. Для радіусів квантового дроту $R \sim a_B$, де $a_B = \frac{\epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2}$ –

борівський радіус для домішки, магнетопольові криві відхиляються одна від одної і асимптотично наближаються до результату об'ємного матеріалу при $R \approx 10a_B$. При збільшенні магнітного поля зменшується циклотронний радіус по відношенню до радіуса дроту і збільшується енергія зв'язку.

На рис.2 зображено графіки залежності енергії зв'язку електрона від напруженості магнітного поля при фіксованих значеннях радіуса КД. Для $R < a_B$ енергія зв'язку нечутлива до магнітного поля, для $R > a_B$ – менша для ширших КД. Це справедливо тільки для полів, напруженість яких $H < 200$ кГс. При малих значеннях напруженості магнітного поля поведінка енергії зв'язку складна, для великих значень полів залежність наближається до лінійної. Дуже сильні магнітні поля втримують електрон біля осі КД.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Coff S.L., Stebe B. Influence of longitudinal and lateral confinements on excitons in cylindrical quantum dot of semiconductors // Phys. Rev. B. - 1993. - **47**, № 3. - P.1383-1391.
2. Greus C., Spiegel R., Knipp P.A., Reinecke T.L. Photoluminescence excitation study of lateral-sub-band structure in barrier-modulated $\text{In}_{0,09}\text{Ga}_{0,91}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum wires // Phys. Rev. B. - 1994. - **49**, №8. - P.3753-3762.
3. Hai G.Q., Peeters F.M., Devreese J.T. Electron Optical-Phonon Coupling in $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ Quantum Wells Due to Interface, Slab and Half-Space Modes // Phys. Rev. B. - 1993. - **48**, №7. - P.4667-4678.
4. Greus C., Butov L., Daiminger F., Forchel A., Knipp P.A., Reinecke T.L. Lateral quantization in the optical emission of Barrier-modulated Wires // Phys. Rev. B. - 1993. - **47**, № 12. - P.7626-7636.
5. Бойчук В.И., Войцехивская О.Н., Головацкий В.А., Ткач Н.В. Спектр заряда в тонкой полупроводниковой пленке, контактирующей с массивными кристаллами произвольных проницаемостей // ФТТ. - 1995. - **37**, № 3. - С.861-871.
6. Schoos D., Mews A., Eychmuller A., Weller H. Quantum-dot quantum well $\text{CdS}/\text{HgS}/\text{CdS}$: theory and experiment // Phys. Rev. B. - 1994. - **49**, № 24. - P.17072-17094.
7. Lin M.F., W. Keneth-Shung Elementary excitations in cylindrical tubules // Phys. Rev. B. - 1993. - **47**, №11. - P.6617-6624.