Энергия связанного состояния примесного центра нулевого радиуса в квантовой проволоке во внешних электрическом и магнитном полях

Э.П. Синявский 1 , С.М. Соковнич 2

¹Институт прикладной физики АН РМ, г. Кишинёв

²Приднестровский государственный университет им. Т.Г. Шевченко, г. Тирасполь, s sokovnich@rambler.ru

Аннотация — Методом потенциала нулевого радиуса определяется энергия примесного полупроводниковой квантовой проволоке, находящейся во внешних магнитном и электрическом полях. Исследуются зависимости энергии связанного состояния от величины электрического и магнитного полей. Показано появление размерно-индуцированных связанных состояний, отсутствующих в объёмном Исследована возможность управления материале. величиной энергии связанного состояния с помощью электрического и магнитного полей.

Ключевые слова — квантовая проволока, квантовая нить, внешние электрическое и магнитное поля, примесные центры, метод потенциала нулевого радиуса, энергия связанного состояния.

I. Введение

Физические свойства наноразмерных структур существенно отличаются от свойств тех же объектов микрометровых размеров. Причём эти отличия не только количественные, но и качественные. При рассмотрении структур с размерами менее 100 нм начинают работать квантовые эффекты и возникают особенности, которые в макрообъектах не существуют.

В настоящее время создано огромное количество разнообразных наноразмерных структур. Это квантовые ямы, квантовые нити, цилиндры и трубки, квантовые точки, сверхрешётки и т.д. Каждый из перечисленных классов сам состоит из множества объектов. Например, квантовая яма может быть с различными профилями потенциала, существуют напряжённые квантовые структуры, структуры, отличающиеся по составу и многие другие. Каждый такой объект имеет свои характерные особенности.

Полупроводниковые квантовые проволоки (КП) — один из наиболее перспективных объектов пониженной размерности, обладают уникальными свойствами. КП уже нашли применение в ряде приборов [1]-[2]. Существуют различные методы получения КП [3]: молекулярно-лучевая эпитаксия, рост из газовой фазы, травление и скалывание двумерной структуры и другие.

В любых структурах пониженной размерности всегда существуют дефекты структуры, примеси

инородных атомов. Эти примеси заметно изменяют физические свойства полупроводника [4-10].

Внешние поля, электрическое и магнитное, также существенно меняют поведение квантоворазмерных систем. В результате их влияния может понижаться размерность системы, меняются многие кинетические и оптические характеристики [11-14].

II. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

В данной работе исследуется энергия связи примесных состояний во внешних электрическом и магнитном полях в полупроводниковых квантовых проволоках с параболическим профилем потенциала.

Направим ось Ox вдоль оси проволоки. Если направить вектор напряжённости электрического поля F вдоль оси Oz, то потенциальная энергия электрона будет равна

$$V(y,z) = \frac{m_c}{2}\omega^2(y^2 + z^2) + eFz$$

Здесь $m_{\rm c}$ - эффективная масса электрона, ω - частота размерного квантования, связанная с параболичностью потенциала проволоки, e - величина заряда электрона.

Если электрическое поле не равно нулю, то минимум потенциальной энергии будет смещён вдоль оси Oz на величину

$$d = -\frac{e \cdot F}{m_c \omega^2} .$$

Пусть магнитное поле направлено также вдоль оси $O_{\mathcal{Z}}$. Выбираем следующую калибровку векторного потенциала A

$$\mathbf{A} = (-H \cdot y, 0, 0),$$

H – напряжённость внешнего магнитного поля.

В результате гамильтониан исследуемой системы принимает вид:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_c} [(\hat{p}_x + eHy/c)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2] + \frac{m_c}{2} \omega^2 (y^2 + z^2) + eFz$$

Уравнение Шредингера с таким гамильтонианом имеет точное решение:

$$\begin{split} \Psi(x,y,z)_{k_x,n,m} &= \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{L_x}} \left(\frac{\lambda_1}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \mathbf{H_n} \left(\sqrt{\lambda_1} \left(y - \frac{\omega_c p_x}{m_c \Omega^2}\right)\right) \\ &\times \exp\left(-\frac{\lambda_1}{2} \left(y - \frac{\omega_c p_x}{m_c \Omega^2}\right)^2\right) \left(\frac{\lambda_2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^m m!}} \\ &\times \mathbf{H_m} \left(\sqrt{\lambda_2} \left(z + \frac{eF}{m_c \omega^2}\right)\right) \exp\left(-\frac{\lambda_2}{2} \left(z + \frac{eF}{m_c \omega^2}\right)^2\right) \end{split}$$

$$E_{k_x,n,m} = \left(\frac{\omega}{\Omega}\right)^2 \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_c} + \hbar\Omega(n + \frac{1}{2}) + \hbar\omega(m + \frac{1}{2}) - \frac{e^2 F^2}{2m_c \omega^2}$$
(1).

Здесь обозначено
$$\lambda_1=\frac{m_c\Omega}{\hbar},~\Omega=\sqrt{\omega^2+\omega_c^2}~,~\omega_c=\frac{eH}{cm_c}~,$$

$$\lambda_2=\frac{m_c\omega}{\hbar}$$
 , импульс $p_x=\hbar k_x$ n и m — натуральные числа или 0 , $\mathrm{H_m}(x)$ — полиномы Эрмита.

При записи гамильтониана не учитывался собственный момент электрона. Учёт спина приводит к постоянному слагаемому в гамильтониане, что в результате означает изменение положения нижнего уровня энергии, то есть фактически лишь сдвиг начала отсчёта энергии.

Как видно из (1) вдоль оси Ох происходит свободное движение электрона.

В дальнейшем будем считать, что выполняется неравенство

$$\frac{eFd_0}{8E_-} << 1 \tag{2},$$

где d_0 — диаметр квантовой проволоки, E_c - величина потенциала на границе проволоки в отсутствии полей. Выполнение условия (2) означает, что рассматриваются такие значения напряжённости электрического поля, при которых в смещённом квадратичном потенциале сохраняется достаточно много размерно-квантованных уровней.

Примесный центр моделируется потенциалом нулевого радиуса. Согласно теории потенциала нулевого радиуса энергия связанного состояния E < 0 определяется из следующего уравнения [15]:

$$1 = V_0 \cdot \left(1 + (x - x_0) \frac{\partial}{\partial x} + (y - y_0) \frac{\partial}{\partial y} + (z - z_0) \frac{\partial}{\partial z} \right) \times G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{x = x', y = y', z = z'} .$$

Здесь $\mathbf{r}'(x',y',z')$ — задаёт положение примеси, V_0 параметр, связанный с глубиной залегания примеси E_{im} в отсутствии полей.

$$E_{im} = \frac{2\pi^2 \hbar^6}{m_c^3 V_0^2} \,.$$

Функция Грина $G_0(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ определяется выражением:

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha} \frac{\Psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \cdot \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}')}{E - E_{\alpha}}$$

где $\alpha = (k_x, n, m)$.

В явном виде это уравнение для исследуемой системы принимает вид:

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{\sqrt{\lambda_1 \lambda_2}}{2\pi^2} \int_0^\infty \exp(-\tau E_0)$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-iK_x(x-x')) \exp\left(-\tau \left(\frac{\hbar^2 K_x^2}{2m_c} + \frac{1}{2}(\hbar\Omega + \hbar\omega) - \Delta\right)\right)$$

$$\times \sum_{n} \frac{\exp(-\tau \cdot \hbar\Omega \cdot n)}{n! \cdot 2^{n}} H_{n} \left[\sqrt{\lambda_{1}} \left(y - y_{01} \right) \right] H_{n} \left[\sqrt{\lambda_{1}} \left(y' - y_{01} \right) \right]$$

$$\times \sum_{n} \frac{\exp(-\tau \cdot \hbar \omega \cdot m)}{m! \cdot 2^{m}} H_{m} \left[\sqrt{\lambda_{2}} \left(z + z_{01} \right) \right] H_{m} \left[\sqrt{\lambda_{2}} \left(z' + z_{01} \right) \right]$$

$$\times \exp\left(-\frac{\lambda_2}{2}\left(\left(z+z_{01}\right)^2+\left(z'+z_{01}\right)^2\right)\right)$$

$$\times \exp\left(-\frac{\lambda_1}{2}\left(\left(y-y_{01}\right)^2+\left(y'-y_{01}\right)^2\right)\right)d\tau \cdot dK_x$$

Здесь

$$E_0 = -E \ , \ \Delta = \frac{e^2 F^2}{2 m_c \omega^2} \ , \ y_{01} = \frac{\hbar \omega_c K_x}{m_c \Omega^2} \ , \ z_{01} = \frac{e E}{2 m_c \omega^2}$$

Для упрощения расчётов будем полагать, что примесь находится на оси проволоки, т.е. x' = y' = z' = 0.

Расчёт функции Грина проводится также как в работе [16] с использованием методики, развитой в [15].

В результате для относительной величины энергии связанного состояния $\varepsilon_0 = -\frac{E}{\hbar\omega} > 0$ получаем следующее уравнение:

$$\sqrt{\varepsilon_0} - \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot v^2}$$

$$\times \int_0^{\infty} \left[\frac{\exp\left(\frac{\Delta}{\hbar\omega} \left(\tau^2 - 2 \cdot \operatorname{th}\left(\frac{\tau^2}{2}\right)\right)\right)}{\sqrt{\operatorname{sh}\left(\frac{\tau^2}{v}\right) \cdot \operatorname{sh}\left(\tau^2\right)\left(\frac{\tau^2}{2v} + \delta^2 \cdot \operatorname{th}\left(\frac{\tau^2}{2v}\right)\right)}} - \frac{\sqrt{2} \cdot v^2}{\tau^3} \right] \right]$$

$$\times \tau \cdot \exp\left(-\varepsilon_0 \tau^2\right) d\tau = \sqrt{\frac{E_{im}}{\hbar\omega}} \tag{3},$$

$$\delta = \frac{\omega_c}{\omega} , v = \frac{1}{\sqrt{1 + \delta^2}} .$$

III. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЁТОВ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 представлены графики зависимости энергии связанного состояния, отсчитанной от дна зоны проводимости в относительных величинах $\varepsilon = -\varepsilon_0 - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{\Omega}{\omega} + \frac{\Delta}{\hbar \omega}$ от величины магнитного поля (δ). Кривая 1 получена в отсутствии электрического поля. Для кривых 2 и 3 отношение $\Delta/\hbar\omega = 0.5$ и 0.9 соответственно. Как видно из графиков с ростом магнитного поля величина энергии связанного состояния монотонно растёт, что характерно для

размерно-ограниченных систем.

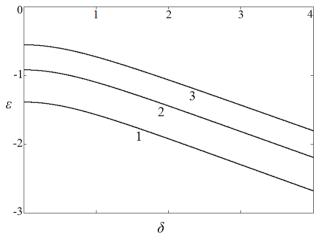


Рис. 1. Зависимость энергии связанного состояния от величины магнитного поля

На рис. 2 представлены графики зависимости энергии связанного состояния ε от величины $\Delta/\hbar\omega$. Кривая 1 получена в отсутствии магнитного поля. Для кривых 2, 3 и 4 $\delta=0.7, 2$ и 4, соответственно.

С ростом Δ величина энергии связанного состояния уменьшается практически по линейному закону. А так как Δ пропорциональна квадрату напряжённости электрического поля, то энергия связанного состояния уменьшается с ростом электрического поля по квадратичному закону.

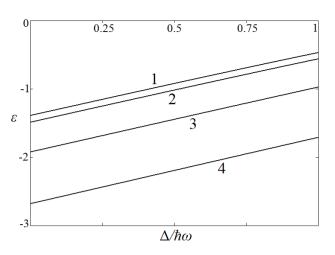


Рис. 2. Зависимость энергии связанного состояния от электрического поля

При параметре $V_0 > 0$ уравнение (3) определяет связанного состояния энергию во внешних электрическом и магнитном полях в случае, когда и в объёмном материале короткодействующий потенциал имеет локализованное состояние. Если $V_{\rm o} < 0$, то в объёмном материале в отсутствии внешних электрического и магнитного полей потенциал нулевого радиуса не имеет связанных состояний [17]. Однако (3) и в случае отсутствия полей допускает решение, т.е. в квантовой проволоке возникают связанные состояния, обусловленные понижением размерности системы – размерно-индуцированные связанные состояния (РИСС). Подобные состояния возникают и в других размерно-ограниченных системах [16], [18], но в исследуемой системе они возможны только если величина электрического поля такова, что $\frac{\Delta}{\hbar\omega}\cong 1+arepsilon_0$, а при малых магнитных полях этой немного величины (если $\frac{\Delta}{\hbar\omega}>\frac{1+\sqrt{1+\delta^2}}{2}+\varepsilon_0 \ \ \text{интеграл в (3) расходится)}.$

Таким образом решение уравнения (3) при отрицательном параметре V_0 , а значит и РИСС возможны не при любых значениях электрического и магнитного полей. При заданном электрическом поле эти состояния возможны при определённых значениях магнитного поля и наоборот. Величина энергии РИСС намного меньше величины энергии обычных связанных состояний при тех же величинах полей.

На рис. 3 представлена зависимость энергии РИСС ε от величины δ . Кривые 1, 2 и 3 получены для $\Delta/\hbar\omega$ равной 1.2, 1.3 и 1.4, соответственно. Энергия РИСС с ростом магнитного поля растёт по величине.

На рис. 4 представлена зависимость энергии РИСС от $\Delta/\hbar\omega$. Кривые 1, 2 и 3 получены для δ раной 0, 0.5 и 0.7, соответственно. С ростом электрического поля энергия РИСС уменьшается по величине.

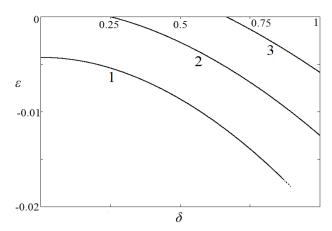


Рис. 3. Зависимость энергии размерно-индуцированного связанного состояния от магнитного поля

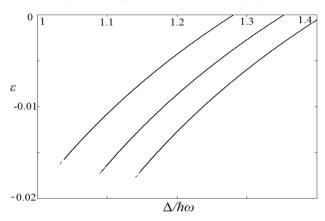


Рис. 4. Зависимость энергии размерно-индуцированного связанного состояния от электрического поля

Если примесь расположена не на оси квантовой проволоки, т.е. $z_0 \neq 0$, то в случае, когда $\mathcal{E}_0 >> 1$, решение (3) можно представить в виде

$$-E \cong E_0 + \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\Omega - \frac{1}{2}\hbar\omega \cdot \lambda_1 \left(z_0 + \frac{eF}{m_c\omega^2}\right)^2 \ (4).$$

Как видно из (4) с ростом электрического поля F

величина энергии связи (-E) уменьшается. Если же поменять направление электрического поля на противоположное, то с ростом F энергия связи увеличивается, достигая максимума при $\frac{eF}{m_c\omega^2}=z_0$

(минимум потенциальной энергии в точке расположения примеси), а затем уменьшается.

Эта немонотонная зависимость энергии связи от электрического поля в случае расположения примеси не на оси проволоки позволяет управлять с помощью электрического поля энергией связи примесного состояния.

IV. ПОДДЕРЖКА

Работа частично поддержана грантом Technology Center in Ukraine, project no. 6219.

Литература

- [1] Wang Y.G., Zou B.S., Wang T.H., Wang N., Cai Y., Chan Y.F., Zhou S.X. I-V characteristics of Schottky contacts of semiconducting ZnSe nanowires and gold electrodes // Nanotechnology. 2006. 17 (9). P. 2420-2423.
- [2] Singh A., Li X. Y., Protasenko V., Galantai G., Kuno M., Xing H. L., Jena D. Polarization-sensitive nanowire photodetectors based on solution-synthesized CdSe quantum-wire solids // Nano Lett.. 2007. 7(10), P. 2999.
- [3] Kash K. Optical properties of III-V semiconductor quantum wires and dots // Journal of Luminescence. 1990. V.46. № 2. P.69-82.
- [4] Dellow M. W., Beton P. H., Langerak C. J. G. M., Foster T. J., Main P. C., Eaves L., Henini M., Beaumont S. P., and Wilkinson C. D. W. Resonant tunneling through the bound states of a single donor atom in a quantum well // Phys. Rev. Lett. 1992. 68. P.1754.
- [5] Cobden D. H., Patel N. K., Pepper M., Ritchie D. A., Frost J. E. F., and Jones G. A. C. Noise and reproducible structure in a GaAs/Al_xGa_{1-x}As one-dimensional channel // Phys. Rev. B. 1991. 44. P. 1938.
- [6] Vargiamidis V. and Polatoglou H. M. Shape effects on scattering in quantum wires with a transverse magnetic field // Phys. Rev. B. 2003. 67. No. 24. 245303.
- [7] Gurvitz S. A. and Levinson Y. B. Resonant reflection and transmission in a conducting channel with a single impurity // Phys. Rev. B. 1993. 47. 10578.
- [8] P. Bagwell. Evanescent modes and scattering in quasi-onedimensional wires. Phys. Rev. B. 1990. 41. 10354.
- [9] Kim C. S., Satanin A.M. Tunneling through a quantum channel with impurities: An exactly solvable model // Physica E. 1999. V. 4, № 3. P.211-219.
- [10] Boese D., Lischka M., and Reichl L. E.. Resonances in a two-dimensional electron waveguide with a single δ -function scattered // Phys. Rev. B. 2000. 61, 5632.
- [11] Sinyavskii E.P., Sokovnich S.M. Intraband light absorption in quasi-two-dimensional system in external electric and magnetic fields // Semiconductors. 1999. V. 33. No. 7. P. 761-764
- [12] Sinyavskii E.P., Karapetyan S. A. Specific features of the charge carrier mobility in nanowires in transverse electric and magnetic fields // Semiconductors. 2014. V. 48. No. 7. P. 216-218.
- [13] Kaplan S. B. and Warren A. C. Magnetoconductance oscillations of a quasi-one-dimensional electron gas in a parabolic transverse potential. // Phys. Rev. B. 1986. 34. 1346.
- [14] Sinyavskii E.P., Khamidullin R.A. Conductivity of quantum wires in uniform magnetic fields // Semiconductors. 2006. V. 40. No. 11. P. 1333-1337.
- [15] Демков Ю.Н., Островский В.Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л.: Изд-во ЛГУ. 1975. 240 с.
- [16] Синявский Э.П., Канаровский Е.Ю. Размерноиндуцированные связанные состояния в квазидвумерных полупроводниковыых системах // ФТТ. 1992. **34**. № 3. С. 737-742.
- [17] Андреев С.П. Спектры и кинетика систем с магнитопримесными состояниями при конечном радиусе потенциала // УФН. 1984. **143**. вып.2. С. 213-228.
- [18] Sinyavskii E.P., Sokovnich S.M. Electrically induced luminescence in parabolic quantum wells in a magnetic field // Physics of the Solid State. 2000. V. 42. No. 9. P. 1734-1737.

The Energy of the Bound State of Zero Radius Impurity Center in a Quantum Wire in External Electric and Magnetic Fields

E.P. Sinyavskii¹, S.M. Sokovnich²

¹Institute of Applied Physics of the Academy of Sciences of Moldova, Chisinau ²Pridnestrovian State University, Tiraspol,

s_sokovnich@rambler.ru

Abstract — The energy of the impurity state in a semiconductor quantum wire located in external magnetic and electric fields is determined by the zero-radius potential method. The dependence of the energy of the bound state on the magnitude of the electric and magnetic fields is investigated. The appearance of dimensionally induced bound states is absent in the bulk material. The possibility of controlling the energy of the bound state from electric and magnetic fields is shown.

Keywords — quantum wire, quantum filament, external electric and magnetic fields, impurity centers, zero-radius potential method, bound-state energy.

REFERENCES

- [1] Wang Y.G., Zou B.S., Wang T.H., Wang N., Cai Y., Chan Y.F., Zhou S.X. I-V characteristics of Schottky contacts of semiconducting ZnSe nanowires and gold electrodes // Nanotechnology. 2006. 17 (9). P. 2420-2423.
- [2] Singh A., Li X. Y., Protasenko V., Galantai G., Kuno M., Xing H. L., Jena D. Polarization-sensitive nanowire photodetectors based on solution-synthesized CdSe quantum-wire solids // Nano Lett.. 2007. 7(10), P. 2999.
- [3] Kash K. Optical properties of III-V semiconductor quantum wires and dots // Journal of Luminescence. 1990. V.46. № 2. P.69-82.
- [4] Dellow M. W., Beton P. H., Langerak C. J. G. M., Foster T. J., Main P. C., Eaves L., Henini M., Beaumont S. P., and Wilkinson C. D. W. Resonant tunneling through the bound states of a single donor atom in a quantum well // Phys. Rev. Lett. 1992. 68. P.1754.
- [5] Cobden D. H., Patel N. K., Pepper M., Ritchie D. A., Frost J. E. F., and Jones G. A. C. Noise and reproducible structure in a GaAs/Al_xGa_{1-x}As one-dimensional channel // Phys. Rev. B. 1991. 44. P.1938.
- [6] Vargiamidis V. and Polatoglou H. M. Shape effects on scattering in quantum wires with a transverse magnetic field // Phys. Rev. B. 2003. 67. P. 245-303.
- [7] Gurvitz S. A. and Levinson Y. B. Resonant reflection and transmission in a conducting channel with a single impurity // Phys. Rev. B 47. 1993. 10578.

- [8] P. Bagwell. Evanescent modes and scattering in quasi-onedimensional wires. Phys. Rev. B 41, 10354 (1990).
- [9] Kim C. S., Satanin A.M. Tunneling through a quantum channel with impurities: An exactly solvable model // Physica E. 1999. V. 4, № 3. P.211-219.
- [10] Boese D., Lischka M., and Reichl L. E.. Resonances in a two-dimensional electron waveguide with a single δ -function scattered // Phys. Rev. B 61, 5632 (2000).
- [11] Sinyavskii E.P., Sokovnich S.M. Intraband light absorption in quasi-two-dimensional system in external electric and magnetic fields // Semiconductors. 1999. V. 33. No. 7. P. 761-764.
- [12] Sinyavskii E.P., Karapetyan S. A. Specific features of the charge carrier mobility in nanowires in transverse electric and magnetic fields // Semiconductors. 2014. V. 48. No. 7. P. 216-218.
- [13] Kaplan S. B. and Warren A. C. Magnetoconductance oscillations of a quasi-one-dimensional electron gas in a parabolic transverse potential. // Phys. Rev. B 34, 1346 (1986)
- [14] Sinyavskii E.P., Khamidullin R.A. Conductivity of quantum wires in uniform magnetic fields // Semiconductors. 2006. V. 40. No. 11. P. 1333-1337.
- [15] Demkov Yu.N., Ostrovskii V.N. Metod potentialov nulevogo radiusa v atomnoi fizike (Method of zero-radius potentials in atomic physics). L.: Izd-vo LGU. 1975. 240 s.
- [16] Sinyavskii E.P., Kanarovskii E.Yu. Razmernoindutsirovannye sviazannye sostoianiya v kvasidvumernyh poluprovodnikovyh sistemah (Dimensional-induced bound states in quasi-two-dimensional semiconductor systems) // FTT. 1992. V. 34. No 3. S. 737-742.
- [17] Andreev S.P. Spektry I kinetika system c magnitoprimesnymi sostoyaniyami pri konechnom radiuse poteciala (Spectra and kinetics of systems with finite range) // UFN. 1984. T. 143. No. 2. S. 213-228.
- [18] Sinyavskii E.P., Sokovnich S.M. Electrically induced luminescence in parabolic quantum wells in a magnetic field // Physics of the Solid State. 2000. V. 42. No. 9. P. 1734-1737