

## СЛАБОРАСПАДНЫЕ КВАЗИСТАЦИОНАРНЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ТЯЖЕЛЫХ СФЕРИЧЕСКИХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

З.С.Грибников, А.Н.Коршак

Институт физики полупроводников НАН Украины  
252650 Киев, Украина

Поступила в редакцию 9 августа 1994 г.

Показано, что энергетический спектр электрона в сферическом гетеровключении типа "потенциального горба" с тяжелой эффективной массой характеризуется набором квазидискретных уровней с большими значениями момента  $l$ , причем времена жизни квазистационарных состояний в горбе тем больше, чем больше  $l$  (то есть чем более возбужденным является состояние). Для избранных параметров численно получены энергии и времена жизни квазистационарных состояний.

1. В последние годы модными объектами физики являются квантовые точки (КТ), представляющие, как правило, гетеровключение более узкощелевого материала в широкощелевую полупроводниковую среду. При этом разрыв электронной зоны организует энергетический профиль, локализирующий движение электрона в пределах КТ, где обычно его эффективная масса меньше, чем во внешней среде.

Предметом рассмотрения в данном сообщении является квантовый объект, создавая который мы поменяли свойствами гетеровключение и окружающую среду, то есть мы рассматриваем широкощелевое включение в узкощелевой среде. При этом исходный энергетический профиль – потенциальный горб (термин заимствован в [1]) – исходно не приводит к локализации электрона, а лишь рассеивает его. Предположим также, что электроны гетеровключения заметно тяжелее электронов узкощелевой среды, и при некотором конечном значении волнового вектора  $k = k_0$  имеет место пересечение электронных термов гетеровключения  $\epsilon_1(k)$  и среды  $\epsilon_2(k)$ :

$$\epsilon_1(k_0) = \epsilon_2(k_0) \quad (1)$$

(для простоты, законы дисперсии  $\epsilon_{1,2}(k)$  предположены изотропными). Все эти предположения проиллюстрированы на рис.1; рассматриваемый объект называем тяжелой квантовой точкой (ТКТ).

Модельным объектом, рассмотренным ниже, является сферическая ТКТ с радиусом  $r_0$ , причем предположено, что при  $r = r_0$  имеет место резкий гетеро-переход с разрывом электронной зоны  $U_0$  (рис.1). Для сравнения на том же рис.1 показан пунктиром потенциальный профиль обычной (сферической) КТ с узкощелевым материалом внутри. Ввиду модельного характера рассмотрения мы ограничились однозонным приближением:

$$\epsilon_1(k) = U_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1}, \quad \epsilon_2(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_2}, \quad m_1 > m_2, \quad (2)$$

при этом  $k_0^2 = (2U_0/\hbar^2)m_1m_2/(m_1 - m_2)$ .

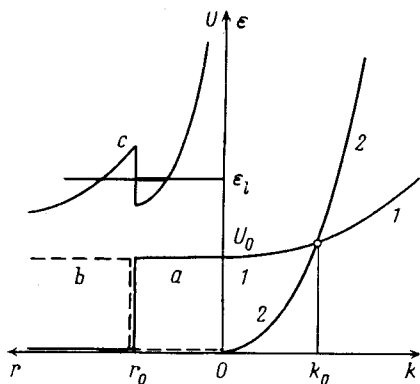


Рис.1

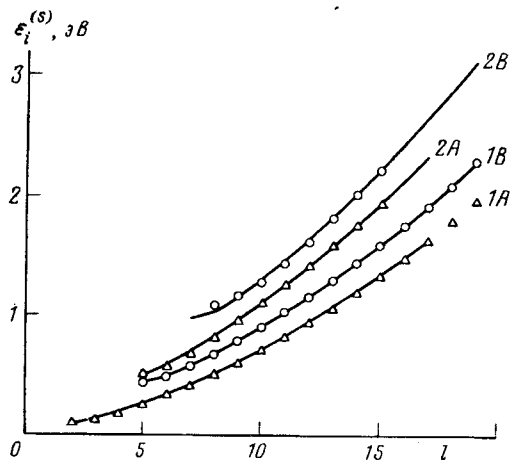


Рис.2

Рис. 1. Законы дисперсии  $\epsilon(k)$  и потенциальные профили  $U(r)$ : 1 -  $\epsilon_1(k)$ , 2 -  $\epsilon_2(k)$ ; а - тяжелая квантовая точка, б - обычная квантовая точка, с - эффективный потенциальный профиль для электрона в ТКТ при достаточно большом  $l$ ;  $U_0$  - разрыв электронных зон на гетерогранице

Рис.2. Энергии квазидискретных уровней  $\epsilon_l^{(s)}$  в зависимости от момента  $l$  для двух значений  $s = 1, 2$  и двух наборов параметров А и В, приведенных в тексте. Сплошные линии - точный численный расчет; точки - результаты первой итерации

## 2. Записывая электронную волновую функцию $\psi(r)$ в виде

$$\psi(r) = Y_{lm}(\theta, \varphi) X_l(r, \epsilon) / r, \quad (3)$$

получим для  $X$  следующие уравнения [1, 2]:

$$X_l'' + \frac{2m_1}{\hbar^2} \left( \epsilon - U_0 - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_1 r^2} \right) X_l = 0, \quad r < r_0, \quad (4)$$

$$X_l'' + \frac{2m_2}{\hbar^2} \left( \epsilon - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_2 r^2} \right) X_l = 0, \quad r > r_0, \quad (5)$$

где  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  - сферическая функция,  $l$  - азимутальное квантовое число (момент) электрона; штрихом обозначена производная по  $r$ ;  $\epsilon > 0$  - энергия электрона, имеющая непрерывный спектр значений. Из (4), (5) видно, что при

$$l(l+1) > 2U_0 r^2 / \hbar^2 (m_2^{-1} - m_1^{-1}) \quad (6)$$

эффективный потенциальный профиль, в котором движется электрон, приобретает "внутреннюю" потенциальную яму (рис.1), в которой электрон квазилокализуется.

Точная функция  $X_l(r, \epsilon)$  должна удовлетворять стандартным условиям при  $r=0$  и  $r=\infty$ , а также

$$X(r_0 - 0) = X(r_0 + 0); \quad \frac{1}{m_1} X'(r_0 - 0) = \frac{1}{m_2} X'(r_0 + 0). \quad (7)$$

Искомая функция имеет вид

$$X_l(r) = p_1 r j_l(p_1 r), \quad r < r_0, \quad (8)$$

$$X_l(r) = p_2 r (\beta_l h_l^{(1)}(p_2 r) + \gamma_l h_l^{(2)}(p_2 r)), \quad r > r_0, \quad (9)$$

где

$$p_1 = \left( \frac{2m_1}{\hbar^2} (\epsilon - U_0) \right)^{1/2}, \quad p_2 = \left( \frac{2m_2 \epsilon}{\hbar^2} \right)^{1/2},$$

$j_l(x)$  – сферическая функция Бесселя первого рода,  $h_l^{(1,2)}(x)$  – сферические функции Бесселя третьего рода [3],  $\beta_l, \gamma_l$  – произвольные константы. Условие существования квазидискретного уровня (см. [1,2]) состоит в отсутствии расходящейся волны при  $r \rightarrow \infty$ , то есть  $\gamma_l = 0$ . Тогда из (7) следует:

$$\frac{p_2 h_l^{(1)'}(p_2 r_0)}{m_2 h_l^{(1)}(p_2 r_0)} = \frac{p_1 j_l'(p_1 r_0)}{m_1 j_l(p_1 r_0)} - \frac{(m_2^{-1} - m_1^{-1})}{r_0}. \quad (10)$$

Уравнение (10) имеет только комплексные корни  $\epsilon_l$ , причем нам интересны лишь те из них, которые находятся в нижней полуплоскости и обладают малым значением мнимой составляющей. Эти корни лежат вблизи нулей функции Бесселя  $J_{l+1/2}(p_1 r_0) = 0$ , то есть

$$\epsilon_l^{(s)} \simeq U_0 + \frac{\hbar^2}{2m_1 r_0^2} (\sigma_{l+1/2}^{(s)})^2, \quad (11)$$

где  $s = 1$  соответствует наименьшему нулю функции  $\sigma^{-(l+1/2)} J_{l+1/2}(\sigma)$ ,  $s = 2$  – следующему за ним и т.д., причем приближение (11) удовлетворительно при  $lm_1/m_2 \gg 1/2$ . На рис.2 приближенные значения действительных составляющих  $\epsilon_l^{(s)}$ , полученные из (10) с использованием (11) в качестве нулевого приближения, построены в зависимости от  $l$  рядом с точными значениями действительных составляющих  $\epsilon_l^{(s)}$ , найденными непосредственным вычислением из (10). Использованы два набора параметров:

$$A) \quad m_2 = 0,041m_0, \quad m_1 = 5m_2, \quad U_0 = 0,01 \text{ эВ};$$

$$B) \quad m_2 = 0,047m_0, \quad m_1 = 4m_2, \quad U_0 = 0,16 \text{ эВ}$$

( $m_0$  – масса свободного электрона). Радиус включения выбран одинаковым:  $r_0 = 75 \text{ \AA}$ . Наряду с "основным" квазидискретным уровнем  $s = 1$  в обоих случаях построен "первый возбужденный" уровень  $s = 2$ . Отметим, что для больших  $l$  ( $> 5$ ) достаточно хорошо работает нулевое приближение (11) с использованием в качестве  $\sigma_{l+1/2}^{(s)}$  асимптотических значений нулей, вычисленных по стандартным формулам [3]. На рис.3 построены для тех же наборов параметров А и В и  $s = 1, 2$  зависимости обратного удвоенного времени жизни электрона на квазидискретном уровне  $1/2\tau$  от момента  $l$ . При этом использована формула

$$\frac{1}{2\tau_l^{(s)}} = -\frac{1}{\hbar} \text{Im} \epsilon_l^{(s)}. \quad (12)$$

Наряду с результатами точных вычислений показаны результаты первой итерации. Из рис.3 видно, что при больших значениях  $l$  имеет место зависимость

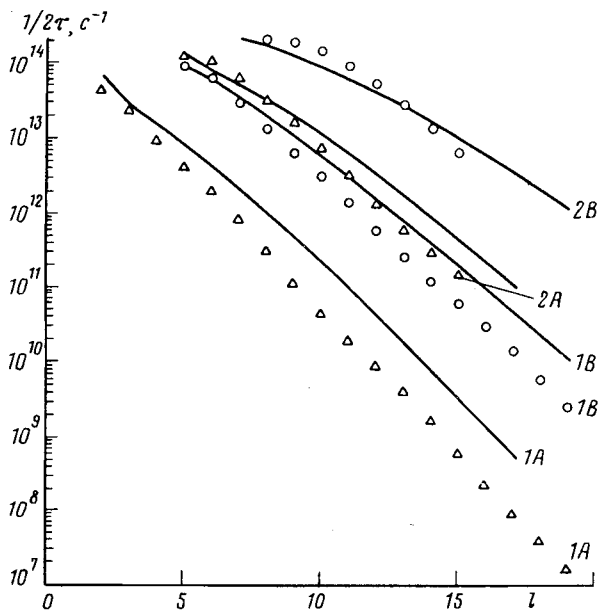


Рис.3. Зависимость обратного удвоенного времени жизни  $1/2\tau_l^{(s)}$  от момента  $l$  для тех же состояний  $s = 1, 2$  и наборов параметров А и В, что на рис.2

$\tau_l^{(s)} \sim \exp(\alpha l)$ , причем константа  $\alpha$  несколько различна для двух наборов параметров, использованных для оценок:  $\alpha_A > \alpha_B$ ; однако для  $s = 1$  и  $s = 2$  эти константы, судя по рис.3, близки друг к другу. Времена жизни состояний  $\tau_l^{(1)}$  примерно в  $10^2$  раз больше времен жизни  $\tau_l^{(2)}$ , так что основные состояния существенно устойчивее первых возбужденных.

Из рис.3 также видно, что результаты вычислений по итерационной процедуре заметно отличаются от точных, хотя сохраняют все качественные признаки их поведения. С уменьшением радиуса ТКТ  $r_0$  энергии  $\epsilon_l^{(s)}$  при больших  $l$  возрастают как  $r_0^{-2}$ , а времена жизни квазистационарных состояний  $\tau_l^{(s)}$  падают как  $r_0^2$ .

Времена жизни  $\tau_l^{(s)}$  в ТКТ при достаточно больших  $l$  и  $r_0$  (как это видно из рис.3) превышают разумные значения времен релаксации импульса и энергии электрона в полупроводнике, то есть такие состояния становятся практически неотличимыми от "стационарных" состояний. (Отметим, что ввиду дискретности спектра большинство переходов с испусканием и поглощением фононов внутри ТКТ будет запрещено.) По своей природе рассмотренные состояния аналогичны рассматривавшимся в работе [4] стационарным состояниям, возникающим в тонких квантовых барьерах с тяжелой электронной массой при больших значениях продольного волнового вектора. Отметим, что в "тяжелых" квантовых проводах такой же природы возможны как стационарные состояния (аналогичные рассмотренным в [4]), так и квазистационарные состояния, подобные рассмотренным выше.

Рассмотрим, для каких гетеропар может быть успешно реализована принятая выше модель, основанная на предположении сравнительно небольшого разрыва электронных зон  $U_0$ , сравнительно малого значения волнового вектора  $k_0$  и сравнительно большого отношения эффективных масс  $m_1/m_2$ . Если оставаться в рамках общепринятых кейновских моделей спектра, то нам инте-

ресны гетеропары с большим различием запрещенных щелей:  $\epsilon_{g1} \gg \epsilon_{g2}$ , причем большая часть изменения щели  $\epsilon_{g1} - \epsilon_{g2}$  должна приходиться на разрыв валентной зоны. Это условие, в частности, не выполняется в таких традиционных изоморфных гетеропарах, как  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  и  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{In}_y\text{Al}_{1-y}\text{As}$  ( $y = y(x)$  из условия изоморфности), в которых большая часть разрыва лежит в электронных зонах. Необходимое нам условие выполнено в изоморфной гетеропаре  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$  (см. [5]), однако отношение масс  $m_1/m_2 \simeq 2$  здесь недостаточно велико. Более удачные комбинации параметров получаются в гетеропереходах с участием широкозонных полупроводников из группы  $\text{A}_{II}\text{V}_{VI}$ . Например, в псевдоморфной гетеропаре  $\text{CdS}/\text{Ge}$ , исследованной в [6], имеем  $U_0 \simeq 0,01$  эВ,  $m_1/m_2 \simeq 5$ , как в рассмотренном выше наборе параметров А; данные набора В приблизительно воспроизводятся в псевдоморфной паре  $\text{CdS}/\text{GaSb}$ . Укажем также на пары  $\text{CdSe}/\text{GaSb}$ ,  $\text{CdSe}/\text{InSb}$  и т.д. (см. параметры указанных пар в [6, 7]).

Другая группа объектов, к которым применимы (качественно) изложенные выше соображения – диэлектрические преципитаты в полупроводниках (а также газовые и вакуумные поры в них). Размеры таких включений колеблются в очень широком диапазоне (включая сюда и нанометрический). При этом пришлось бы иметь дело с разностями энергий электронного сродства порядка 3–4 эВ (например, в случае  $\text{Si}/\text{SiO}_2$  это  $\sim 3,2$  эВ [8]), что исключает применение однозонного или кейновского рассмотрения и позволяет говорить только о качественной картине.

Захват электронов на высоколежащие квазидискретные слабобраспадные уровни ТКТ может существенно повлиять на сильнополевой (горячий) электронный транспорт в материале матрицы при достаточной концентрации таких ТКТ, полностью выводя из игры (подобно традиционным электронным ловушкам) захваченные электроны. В то же время переходные процессы захвата и возврата здесь совершенно иные и описываются малыми временами.

Поскольку наше рассмотрение носило модельный характер, мы не учли в гамильтониане потенциал сил изображения, вклад которых в сдвиг уровней (согласно оценкам [9]) невелик при принятых нами параметрах.

- 
1. Л.Ландау, Е.М.Лифшиц, Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука (1989).
  2. А.И.Базь, Я.Б.Зельдович, А.М.Переломов, Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука (1966).
  3. Справочник по специальным функциям. Ред. М.Абрамовиц, И.Стиган, М.: Наука (1979).
  4. З.С.Грибников, О.Э.Райчев, ЖЭТФ **95**, 996 (1989).
  5. J.R.Waldrup, E.A.Krant, C.W.Farley, and R.W.Grant, J. Appl. Phys. **69**, 372 (1991).
  6. A.D.Katnani and G.Margaritondo, Phys. Rev. B **28**, 1944 (1983).
  7. W.Pollard, J. Appl. Phys. **69**, 3154 (1991).
  8. С.Зи. Физика полупроводниковых приборов, 1, М.: Мир (1984). (S.M.Sze. Physics of semiconductor devices. NY, J.Wiley&Sons, 1981).
  9. S.I.Pokutnyi and N.A.Efremov. Phys. Stat. Sol. (b) **165**, 109 (1991).