Elipsoidinio slėnio elektronų spektras sferiniame kvantiniame taške

Energy spectrum of ellipsoidal valley electrons in a spherical quantum dot

E. Pozingytė, B. Čechavičius, V. Karpus
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Puslaidininkių optikos laboratorija, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius
evelina.pozingyte@ftmc.lt

Elektronų energijos spektras netiesioginių puslaidininkių nanokristalituose priklauso nuo nanokristalitų (kvantinių taškų, QD) radiuso r_0 ir elektrono efektinių masių m_1, m_2, m_3 elipsoidiniame slėnyje. Masių anizotropija paprastai yra ženkli,– silicyje $m_1 = m_2 = 0.19$, $m_3 = 0.916$, germanyje $m_1 = m_2 = 0.082$, $m_3 = 1.58$. Bismuto, kurio kvantiniai taškai buvo užauginti [1] darbe, T-slėniuose $m_1 = m_2 = 0.059$, $m_3 = 0.634$, L-slėniuose $m_1 = 0.0052$, $m_2 = 0.0136$, $m_3 = 1.21$.

Šiame darbe atlikti elipsoidinio slėnio elektronų spektro sferiniame kvantiniame taške skaičiavimai.

Be galo aukštų potencinių barjerų kvantiniam taškui Schrödinger'io lygtis bedimensiniuose kintamuosiuose $x = x/r_0$, $y = y/r_0$, $z = z/r_0$ turi pavidalą

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \mu_2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \mu_3 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \pi^2 \epsilon\right] \psi = 0 \tag{1}$$

ir turi būti sprendžiama esant kraštinei sąlygai $\psi|_{r=1} = 0$. Pastarojoje lygtyje $\epsilon = \varepsilon/W$ – elektrono energija, matuojama dimensinio kvantavimo energijos $W = \pi^2\hbar^2/2m_1r_0^2$ vienetais, m_1 – mažiausia iš efektinių masių ($m_1 \le m_2 \le m_3$), $\mu_2 = m_1/m_2$ ir $\mu_3 = m_1/m_3$ – santykinės atvirkštinės masės ($0 \le \mu_3 \le \mu_2 \le 1$). Naudojantis kintamųjų pakeitimu $\tilde{y} = y/\sqrt{\mu_2}$, $\tilde{z} = z/\sqrt{\mu_3}$ nesunku įsitikinti, kad elipsoidinio slėnio elektronų sferiniame QD uždavinys yra ekvivalentus sferinio slėnio elektronų elipsoidiniame QD ($x^2 + \mu_2\tilde{y}^2 + \mu_3\tilde{z}^2 \le 1$) uždaviniui.

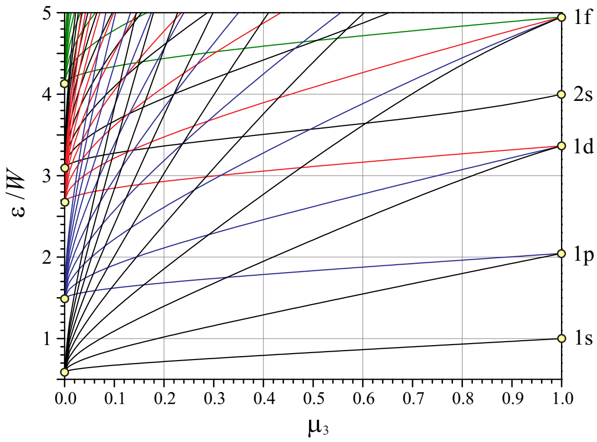
Schrödinger'io lygtį (1) galima tiksliai išspręsti elipsoidinėje koordinačių sistemoje, kurioje kintamieji atsiskiria ir pilnutinę banginę funkciją galima išreikšti kaip parcialinių funkcijų, tenkinančių Lamé bangines lygtis, sandaugą [2]. Tai įgalina rasti QD energijos spektrą esant bet kurioms santykinių masių μ_2, μ_3 vertėms.

Skaičiavimų rezultatus iliustruoja 1 pav., kuriame pateikta kvantinio taško energijos spektro priklausomybė nuo santykinės masės μ_3 (esant $\mu_2 = 1$). Ribiniais $\mu_3 = 1$ ir $\mu_3 = 0$ atvejais, kurie atitinka sferinio slėnio elektronų spektrą kvantiniame taške ir cilindrinėje kvantinėje vieloje, skaičiavimų rezultatai atkartoja žinomus analitinius rezultatus [3]. Kaip matyti iš 1 pav., elipsoidinio slėnio elektronų energijos spektras esant stipriai masių anizotropijai ($\mu_3 \ll 1$) yra labai tankus ir tuo ženkliai skiriasi nuo sferinio slėnio elektronų energijos spektro ($\mu_3 = 1$). Pastarąjį sudaro išsigimę pagal magnetinį kvantinį skaičių m energijos lygmenys, kurie skyla į $|m| = 0, 1, \ldots, l$ komponentes.

Esant silpnai masių anizotropijai, laikant $(1-\mu_3) \ll 1$ perturbacijos parametru, galima atlikti artutinius analitinius skaičiavimus. Gauta analitinė ϵ-spektro formulė atitinka branduolinėje fizikoje žinomus Migdalo rezultatus.

Esant stipriai masių anizotropijai ($\mu_3 \ll 1$), artutinį Schrödinger'io lygties sprendimą galima atlikti naudojantis adiabatiniu artiniu. Riboje $\mu_3 = 0$, spektrą sudaro cilindrinės kvantinės vielos energijos lygmenys, kurie, esant baigtiniam μ_3-parametrui, skyla į be galo daug lygmenų (1 pav. pavaizduota tik dalis jų), atitinkančių išilginio kvantinei vielai judėjimo pajuostę. Atlikti skaičiavimai rodo, kad adiabatinis artinys pakankamai aukštu tikslumu (santykinė paklaida < 2 %) aproksimuoja QD energijos spektrą $0 < \mu_3 < 0.2$ srityje, atitinkančioje praktiškai svarbias μ_3-parametro vertes ($\mu_3 = 0.05$, 0.09, 0.21 germanyje, Bi-T ir Si, atitinkamai).

Šis ypatumas pagrindžia adiabatinio artinio naudojimą baigtinio barjero kvantinių taškų energijos spektro skaičiavimams. Esant baigtiniam kvantinio taško barjerui, kintamieji elipsoidinėje koordinačių sistemoje neatsiskiria, ir tikslaus Schrödinger'io lygties sprendimo atlikti nepavyksta. Adiabatinis artinys, esant stipriai masių anizotropijai, tuomet tampa pagrindiniu QD spektro tyrimo instrumentu. (Skaitmeninį sprendimą apsunkina erdvės diskretizavimo problema.)



1 pav. Sferinio kvantinio taško energijos spektro priklausomybė nuo santykinės (atvirkštinės) masės $\mu_3 = m_1/m_3$, esant $\mu_2 = 1$ ($m_2 = m_1$).

Reikšminiai žodžiai: sferiniai kvantiniai taškai, elipsoidiniai kvantiniai taškai

Literatūra

[1] R. Butkutė, G. Niaura, E. Pozingytė, B. Čechavičius, A. Sielskis, M. Skapas, V. Karpus, and A. Krotkus, Nanoscale Research Letters **12**, 436 (2017).
[2] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Washington, NBS, 1964).
[3] V. Karpus, *Dvimačiai elektronai* (Vilnius, Ciklonas, 2004).