

УДК 535.8; 537.9; 539.33
doi:10.21685/2072-3040-2022-1-7

**Особенности рекомбинационного излучения
в квантовых точках с примесными комплексами ($A^+ + e$)
во внешнем электрическом поле. Часть I. Влияние внешнего
электрического поля на энергию связи дырки в примесном
комплексе ($A^+ + e$) в сферически-симметричной квантовой точке**

А. В. Левашов¹, В. Д. Кревчик², М. Б. Семенов³, А. В. Разумов⁴

^{1,2,3,4}Пензенский государственный университет, Пенза, Россия

^{1,2,3,4}physics@pnzgu.ru

Аннотация. *Актуальность и цели.* В последнее время наблюдается возрастающий интерес к исследованию влияния эффектов электрического поля на свойства полупроводниковых квантовых точек. Это связано с тем, что в таких системах имеется высокая степень свободы в управлении зонной структурой и энергией связи примесных состояний, что важно с точки зрения приборных приложений. Особый интерес представляет исследование влияния электрического поля на примесные A^+ -состояния, которые способны образовывать с неравновесными электронами долгоживущие комплексы ($A^+ + e$). Варьирование величины внешнего электрического поля открывает возможности для управления энергией связи A^+ -состояния, концентрацией носителей заряда, а также оптическими свойствами квазиуменьшенных структур. Цель работы заключается в теоретическом исследовании влияния внешнего электрического поля на энергию связи дырки в примесном комплексе ($A^+ + e$) в сферически-симметричной квантовой точке (КТ). *Материалы и методы.* Взаимодействие электрона, находящегося в основном состоянии квантовой точки, и дырки, локализованной на A^+ -центре, рассматривается в рамках адиабатического приближения. Дисперсионное уравнение, определяющее зависимость энергии связи дырки в примесном комплексе ($A^+ + e$) в сферически-симметричной квантовой точке от величины внешнего электрического поля, получено в рамках модели потенциала нулевого радиуса в приближении эффективной массы. Все кривые построены для квантовых точек на основе InSb. *Результаты.* В модели потенциала нулевого радиуса в адиабатическом приближении получено аналитическое решение задачи о связанных состояниях дырки в комплексе ($A^+ + e$) в сферически-симметричной квантовой точке при наличии внешнего электрического поля. Рассмотрены случаи центрированного и нецентрированного расположения A^+ -центра в квантовой точке. Показано, что кривая полевой зависимости энергии связи A^+ -центра имеет характерный максимум, положение которого связано с динамикой адиабатического потенциала во внешнем электрическом поле. Показано, что существует пороговое значение напряженности внешнего электрического поля, при котором существование связанного A^+ -состояния становится невозможным. *Выводы.* Монотонный ход зависимости энергии связи A^+ -состояния от радиуса КТ нарушается при нецентрированном расположении A^+ -центра. Для определенных значений радиуса КТ энергия связи достигает максимального значения, что связано с совпадением положения A^+ -центра и минимума адиабатического потенциала.

Ключевые слова: квантовая точка, примесный комплекс, метод потенциала нулевого радиуса, адиабатическое приближение, внешнее электрическое поле

Финансирование: работа выполнена при поддержке гранта Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 0748-2020-0012.

© Левашов А. В., Кревчик В. Д., Семенов М. Б., Разумов А. В., 2022. Контент доступен по лицензии Creative Commons Attribution 4.0 License / This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 License.

Для цитирования: Левашов А. В., Кревчик В. Д., Семенов М. Б., Разумов А. В. Особенности рекомбинационного излучения в квантовых точках с примесными комплексами ($A^+ + e$) во внешнем электрическом поле. Часть I. Влияние внешнего электрического поля на энергию связи дырки в примесном комплексе ($A^+ + e$) в сферически-симметричной квантовой точке // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2022. № 1. С. 66–82. doi:10.21685/2072-3040-2022-1-7

**The features of recombination radiation in quantum dots
with an ($A^+ + e$) impurity complex in an external electric field.
Part 1. Effect of an external electric field on the binding
energy of a hole in an ($A^+ + e$) impurity complex
in a spherically symmetric quantum dot**

A.V. Levashov¹, V.D. Krevchik², M.B. Semenov³, A.V. Razumov⁴

^{1,2,3,4}Penza State University, Penza, Russia

^{1,2,3,4}physics@pnzgu.ru

Abstract. *Background.* Recently, there has been growing interest in studying the influence of electric field effects on the properties of semiconductor quantum dots. This is due to the fact that in such systems there is a high degree of freedom in controlling the band structure and binding energy of impurity states, which is important from the point of view of instrumental applications. Of particular interest is the study of the effect of an electric field on impurity A^+ states, which are capable of forming long-lived ($A^+ + e$) complexes with nonequilibrium electrons. Varying the strength of the external electric field opens up possibilities for controlling the binding energy of the A^+ state, the concentration of charge carriers, and also the optical properties of quasi-zero-dimensional structures. The purpose of this work is to theoretically study the effect of an external electric field on the binding energy of a hole in an ($A^+ + e$) impurity complex in a spherically symmetric quantum dot (QD). *Materials and methods.* The interaction between an electron in the ground state of a quantum dot and a hole localized at the A^+ center is considered within the framework of the adiabatic approximation. The dispersion equation that determines the dependence of the hole binding energy in the ($A^+ + e$) impurity complex in a spherically symmetric quantum dot on the magnitude of the external electric field was obtained within the framework of the zero radius potential model, in the effective mass approximation. All curves are plotted for quantum dots based on InSb. *Results.* An analytical solution of the problem of bound states of a hole in the ($A^+ + e$) complex in a spherically symmetric quantum dot in the presence of an external electric field is obtained in the zero-radius potential model in the adiabatic approximation. The cases of centered and non-centered location of the A^+ center in a quantum dot are considered. It is shown that the field dependence curve of the binding energy of the A^+ center has a characteristic maximum, the position of which is related to the dynamics of the adiabatic potential in an external electric field. It is shown that there is a threshold value of the external electric field strength at which the existence of a bound A^+ state becomes impossible. *Conclusions.* The monotonic behavior of the dependence of the binding energy of the A^+ state on the QD radius is broken if the A^+ center is not centered. For certain values of the QD radius, the binding energy reaches its maximum value, which is associated with the coincidence of the position of the A^+ center and the minimum of the adiabatic potential.

Keywords: quantum dot, impurity complex, zero radius potential method, adiabatic approximation, external electric field

Acknowledgments: the work was supported within the grant No. 0748-2020-0012 of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation.

For citation: Levashov A.V., Krevchik V.D., Semenov M.B., Razumov A.V. The features of recombination radiation in quantum dots with ($A^+ + e$) impurity complex in an external

electric field. Part 1. Effect of an external electric field on the binding energy of a hole in $(A^+ + e)$ impurity complex in a spherically symmetric quantum dot. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* = *University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2022;(1):66–82. (In Russ.). doi:10.21685/2072-3040-2022-1-7

Введение

В настоящее время интенсивно исследуются электрооптические свойства полупроводниковых квазиульмерных структур со сферической симметрией, выращенных в диэлектрических матрицах. Интерес к таким исследованиям стимулирован прежде всего тем, что подобные гетерофазные системы являются перспективным материалом для создания приборов нелинейной оптоэлектроники (в частности, таких как детекторы излучения далекого инфракрасного спектра). Свойства подобных наноструктур во многом зависят от наличия примесей и их энергетической структуры. В частности, хорошо известно, что в подобных структурах могут существовать акцепторные примеси, так называемые A^+ -центры, которые образуются путем присоединения дополнительной дырки к нейтральному акцептору. Для расчета энергии связи и волновых функций таких дефектов широко используется модель потенциала нулевого радиуса [1–3].

Существует достаточно много работ, посвященных изучению влияния внешнего электрического поля на энергетические и оптические свойства мелких примесных центров в различных наноструктурах [4–12]. Однако следует отметить, что в основном рассматриваются только донорные или водородо-подобные примесные центры. Так, в работе [5] изучалось влияние электрического поля на донорные примесные центры в квантовых ямах с параболическим потенциальным профилем. Изучению влияния внешнего электрического поля на энергию связи примесного центра в квантовых точках (КТ) в рамках вариационного подхода посвящены работы [6–12].

В случае примесного комплекса $(A^+ + e)$ мы имеем трехчастичную задачу, которая может быть решена аналитически в рамках адиабатического приближения. В этом приближении кулоновский потенциал взаимодействия электрона, локализованного в основном состоянии КТ, с дыркой, локализованной на A^+ -центре, усредняется по волновым функциям электрона с последующим разложением в ряд, в результате получается параболический потенциал для дырки (или адиабатический потенциал электрона), положение минимума которого зависит от напряженности внешнего электрического поля, что может существенно влиять на величину энергии связи дырки в комплексе $(A^+ + e)$.

Цель данной работы заключается в теоретическом исследовании влияния внешнего электрического поля на энергию связи дырки в примесном комплексе $(A^+ + e)$ в сферически-симметричной КТ.

Энергетический спектр A^+ -центра в сферически-симметричной квантовой точке во внешнем электрическом поле

Рассмотрим A^+ -состояние в сферически-симметричной КТ. Будем считать, что КТ имеет форму шара радиуса R_0 и ее потенциальный профиль со-

ответствует потенциальному профилю сферически-симметричной прямоугольной ямы бесконечной глубины. В этом случае потенциальная энергия, отсчитываемая от «дна» ямы, может быть представлена как

$$U(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, & \text{если } r \leq R_0, \\ \infty, & \text{если } r \geq R_0. \end{cases} \quad (1)$$

Будем считать, что вектор напряженности внешнего электрического поля направлен по оси z $\mathbf{F} = (0, 0, E)$. Взаимодействие электрона, локализованного в основном состоянии КТ с дыркой, локализованной на A^+ -центре, будем рассматривать в рамках адиабатического приближения. Как известно [7, 8], адиабатическое приближение приводит к задаче об изотропном трехмерном гармоническом осцилляторе. Характерными длинами задачи являются: a_e и a_h – эффективные боровские радиусы электрона и дырки соответственно; R_0 – радиус КТ; λ_n^{-1} – радиус локализации дырки на A^+ -центре. Теоретическое рассмотрение проводится в рамках метода эффективной массы, т.е. в предположении, что все характерные длины велики по сравнению с постоянной решетки a_0 . Проанализируем случай $a_0 \ll \lambda_n^{-1} \leq a_h \ll R_0 \leq a_e$, который позволяет рассмотреть движение тяжелой дырки в электронном потенциале, усредненном по движению электрона (адиабатическое приближение) и учесть взаимодействие электрона и дырки, локализованной на A^+ -центре. Электронный потенциал $V_{nlm}(\mathbf{r})$, действующий на дырку, в рамках адиабатического приближения в первом порядке теории возмущений в сферически-симметричной КТ с потенциальным профилем (1), можно представить в следующем виде [13]:

$$V_{n,l,m}(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{\varepsilon} \int_0^{R_0} \frac{|\Psi_{n,l,m}(\mathbf{r})|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_e|} d\mathbf{r}, \quad (2)$$

где $\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = Y_{l,m}(\theta, \varphi) \sqrt{2} J_{l+1/2}(k_{l,n} r) / (R_0 \sqrt{r} J_{l+3/2}(k_{l,n} R_0))$ – электронные волновые функции.

В присутствии внешнего электрического поля потенциал (2) для основного состояния электрона ($l = 0, m = 0$) можно записать в следующем виде:

$$V_{n,0,0}(\mathbf{r}) = -\frac{e^2 \beta_n^s}{\varepsilon R_0} + \frac{m_h^* \omega_n^2 r^2}{2} + e F z, \quad (3)$$

где

$$\beta_n^s = \gamma_0 - \text{Ci}(2\pi n) + \ln(2\pi n),$$

$$\hbar \omega_n = \left[(2\hbar^2 \pi^2 n^2 e^2) / (3m_h^* R_0^3 \varepsilon) \right]^{1/2};$$

n – квантовое число электрона; m_h^* – эффективная масса дырки.

Потенциал (3) может быть представлен в виде

$$V_{n,0,0}(r) = \frac{m_h^* \omega_n^2}{2} (x^2 + y^2 + (z + z_0)^2) - \frac{e^2 \beta_n^s}{\epsilon R_0} - \frac{e^2 F^2}{2m_h^* \omega_n^2}, \quad (4)$$

где $z_0 = eF / m_h^* \omega_n^2$.

Таким образом, задача сводится к нахождению волновых функций и энергетических уровней трехмерного параболического осциллятора с потенциалом (4). Из формулы (4) видно, что положение дна потенциальной ямы дырки в КТ смещается по оси z на величину z_0 и происходит сдвиг всех уровней размерного квантования на величину, соответствующую последнему члену в формуле (4) (рис.1).

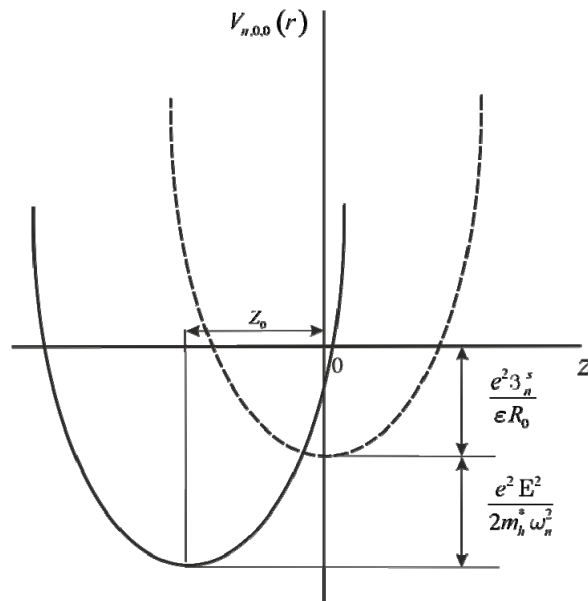


Рис. 1. Энергетическая схема сдвига энергетических уровней и минимума адиабатического потенциала электрона в КТ (энергетическая ось направлена в сторону потолка валентной зоны)

Уровни энергии такого осциллятора даются в виде

$$E_{n1,n2,n3}^{n,0,0} = -\frac{e^2}{\epsilon R_0} \beta_n^s - \frac{e^2 F^2}{2m_h^* \omega_n^2} + \hbar \omega_n \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right), \quad (5)$$

а соответствующие одночастичные волновые функции в нашем случае запишутся как

$$\Psi_{n1,n2,n3}^n(x,y,z) = C_n \exp \left(-\frac{x^2 + y^2 + (z - z_0)^2}{2a_n^2} \right) \times \\ \times H_{n1} \left(\frac{x}{a_n} \right) H_{n2} \left(\frac{y}{a_n} \right) H_{n3} \left(\frac{z - z_0}{a_n} \right), \quad (6)$$

где $C_n = \left[2^{n_1+n_2+n_3} n_1! n_2! n_3! \pi^{3/2} a_n^3 \right]^{-1/2}$, $a_n = \sqrt{\hbar / (m_h^* \omega_n)}$, $H_n(x)$ – полиномы Эрмита; n_1, n_2, n_3 – квантовые числа, соответствующие энергетическим уровням гармонического осциллятора. Разложение (3) и формула (5) применимы, если выполняются одновременно следующие условия [15]:

$$\begin{aligned} \frac{e^2}{\varepsilon R_0} &\gg \hbar \omega_n (n_1 + n_2 + n_3), \\ E_{e,1,0,0} &\gg \frac{e^2 F^2}{2m_h^* \omega_n^2}, \end{aligned} \quad (7)$$

где $E_{e,1,0,0} = \hbar^2 \pi^2 / (2m_e^* R_0^2)$ – энергия электрона в основном состоянии.

При не очень больших значениях n_1, n_2, n_3 выполнение этих неравенств обеспечивается условием $a_h \ll R_0$. При больших значениях n , когда первое из неравенств (7) нарушается, кулоновское взаимодействие электрона с дыркой можно считать слабым и волновая функция дырки определяется потенциалом (1). Последнее неравенство (7) обеспечивает справедливость адиабатического приближения при наложении внешнего электрического поля. Так, для КТ InSb ($m_e = 0,012m_0$, $m_h = 0,6m_0$, m_0 – масса свободного электрона) при $R_0 = 32$ нм и $F = 60$ кВ/м $E_{e,1,0,0}$ больше штарковского сдвига уровней размерного квантования дырки приблизительно в 10 раз.

Для определения энергии связи дырки, локализованной на A^+ -центре в адиабатическом приближении, необходимо построить одночастичную функцию Грина $G(r, R_a; E_{\lambda n})$ к уравнению Шредингера с гамильтонианом, содержащим потенциал (4):

$$G(r, R_a; E_n) = - \sum_{n_1, n_2, n_3} \frac{\Psi_{n_1, n_2, n_3}^{n*}(x_a, y_a, z_a) \Psi_{n_1, n_2, n_3}^n(x, y, z)}{|E_n| + \hbar \omega_n (n_1 + n_2 + n_3)}, \quad (8)$$

где $|E_n| = |E_{\lambda n}| - e^2 \beta_n^s / (\varepsilon R_0) - e^2 F^2 / 2m_h^* \omega_n^2 + 3\hbar \omega_n / 2$ – энергия связи дырки, отсчитываемая от уровня энергии основного состояния осцилляторной сферически-симметричной потенциальной ямы; $E_{\lambda n} = -\hbar^2 \lambda_n^2 / (2m_h^*)$.

Для функции Грина (8) с учетом (6) получим

$$\begin{aligned} G(r, R_a, E_n^{A^+}) &= - \frac{\exp\left(-\frac{\rho^2 + (z - z_0)^2 + \rho_a^2 + (z_a - z_0)^2}{2a_n}\right)}{\pi^{\frac{3}{2}} a_n^2} \times \\ &\times \sum_{n_1, n_2, n_3} \frac{H_{n_1}\left(\frac{x}{a_n}\right) H_{n_1}\left(\frac{x_a}{a_n}\right) H_{n_2}\left(\frac{y}{a_n}\right) H_{n_2}\left(\frac{y_a}{a_n}\right) H_{n_3}\left(\frac{z - z_0}{a_n}\right) H_{n_3}\left(\frac{z_a - z_0}{a_n}\right)}{2^{n_1}! 2^{n_2}! 2^{n_3}! n_1! n_2! n_3!} \times \end{aligned}$$

$$\times \frac{1}{\hbar\omega_n (|\varepsilon_{\lambda n}| + n_1 + n_2 + n_3)}, \quad (9)$$

где соответственно

$$\varepsilon_{\lambda n} = \left| E_n^{A^+} \right| / \hbar\omega_n = |E_{\lambda n}| / \hbar\omega_n - e^2 \beta_n^s / \varepsilon R_0 \hbar\omega_n - e^2 F^2 / 2m_h^* \hbar\omega_n^3 + 3/2,$$

$\mathbf{R}_a = (\rho_a, (z_a - z_0), \varphi_a)$, $\mathbf{r} = (\rho, z - z_0, \varphi)$ – радиус-вектора в цилиндрической системе координат, далее, учитывая, что

$$-\frac{1}{\hbar\omega_n} \frac{1}{(|\varepsilon_{\lambda n}| + n_1 + n_2 + n_3)} = -\frac{1}{\hbar\omega_n} \int_0^\infty dt e^{-t(\varepsilon_{\lambda n} + n_1 + n_2 + n_3)}, \quad (10)$$

выражение для функции Грина примет следующий вид:

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, \mathbf{R}_a, E_n^{A^+}) = & -\frac{1}{\pi^{3/2} a_n^2 \hbar\omega_n} e^{-\frac{\rho^2 + (z - z_0)^2 + \rho_a^2 + (z_a - z_0)^2}{2a_n}} \times \\ & \times \int_0^\infty dt e^{-t\varepsilon_{\lambda n}} \sum_{n_1} \left(\frac{e^{-t}}{2} \right) \frac{H_{n_1} \left(\frac{x}{a_n} \right) H_{n_1} \left(\frac{x_a}{a_n} \right)}{n_1!} \times \\ & \times \sum_{n_2} \left(\frac{e^{-t}}{2} \right) \frac{H_{n_2} \left(\frac{y}{a_n} \right) H_{n_2} \left(\frac{y_a}{a_n} \right)}{n_2!} \sum_{n_3} \left(\frac{e^{-t}}{2} \right) \frac{H_{n_3} \left(\frac{z - z_0}{a_n} \right) H_{n_3} \left(\frac{z_a - z_0}{a_n} \right)}{n_3!}. \quad (11) \end{aligned}$$

Суммирование в (11) по квантовым числам $n_1 n_2 n_3$ можно выполнить, воспользовавшись формулой Меллера для производящей функции полиномов Эрмита:

$$\sum_{k=0}^\infty \left(\frac{z}{2} \right)^k \frac{H_k(x) H_k(y)}{k!} = \frac{1}{\sqrt{1 - z^2}} \exp \left(\frac{2xyz - (x^2 + y^2)z^2}{1 - z^2} \right). \quad (12)$$

Окончательно для функции Грина в цилиндрической системе координат будем иметь

$$\begin{aligned} G(\rho, z, \varphi, \rho_a, z_a, \varphi_a, E_n^{A^+}) = & -\frac{1}{\pi^{3/2} a_n^2 \hbar\omega_n} e^{-\frac{\rho^2 + \rho_a^2 + (z - z_0)^2 + (z_a - z_0)^2}{2a_n}} \times \\ & \times \int_0^\infty dt e^{-t\varepsilon_{\lambda n}} (1 - e^{-2t})^{-3/2} \exp \left[\left(2e^{-t} (\rho \rho_a \cos(\varphi_a - \varphi) + (z - z_0)(z_a - z_0)) - \right. \right. \end{aligned}$$

$$-e^{-2t} \left(\rho^2 + \rho_a^2 + (z - z_0)^2 + (z_a - z_0)^2 \right) / \left(a_n^2 (1 - e^{-2t}) \right) \Bigg]. \quad (13)$$

Далее, используя формулу для интеграла Вебера

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_0^\infty \frac{du}{u\sqrt{u}} e^{-\frac{\xi^2}{2u} - \beta u} = \frac{1}{2\pi} \frac{e^{-\sqrt{2\beta\xi}}}{\xi}, \quad (14)$$

где $\xi = |\mathbf{r} - \mathbf{R}_a| / a_n$; $\beta = \varepsilon_{\lambda n}$, выделим расходящуюся часть в (13):

$$\begin{aligned} G\left(\rho, z, \varphi, \rho_a, z_a, \varphi_a, E_n^{A^+}\right) &= \frac{1}{\pi^{3/2} a_n^2 \hbar \omega_n} \times \\ &\times \left\{ -\frac{a_n}{2\pi} \frac{e^{-\sqrt{2\varepsilon_{\lambda n}} \sqrt{(\rho^2 + \rho_a^2 - 2\rho\rho_a \cos(\varphi_a - \varphi) + (z - z_a)^2)}}}{\sqrt{(\rho^2 + \rho_a^2 - 2\rho\rho_a \cos(\varphi_a - \varphi) + (z - z_a)^2)}} - \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_0^\infty dt e^{-t\varepsilon_{\lambda n}} \times \right. \\ &\times \left[\exp\left\{ \left(2e^{-t} (\rho\rho_a \cos(\varphi_a - \varphi) + (z - z_0)(z_a - z_0)) - \right. \right. \right. \\ &\left. \left. \left. -e^{-2t} (\rho^2 + \rho_a^2 + (z - z_0)^2 + (z_a - z_0)^2) \right) / \left(a_n^2 (1 - e^{-2t}) \right) \right\} \times \right. \\ &\times e^{-\frac{(\rho^2 + \rho_a^2 + (z - z_0)^2 + (z_a - z_0)^2)}{2a_n} \frac{(1 - e^{-2t})^{-3/2}}{2^{-3/2}}} - \\ &\left. \left. - \frac{1}{t\sqrt{t}} e^{-\frac{(\rho^2 + \rho_a^2 - 2\rho\rho_a \cos(\varphi_a - \varphi) + (z - z_a)^2)}{2a_n^2 t}} \right] \right\}. \quad (15) \end{aligned}$$

В результате получим

$$\begin{aligned} G\left(\rho, z, \varphi, \rho_a, z_a, \varphi_a, E_n^{A^+}\right) &= \\ &= G_0\left(\rho, z, \varphi, \rho_a, z_a, \varphi_a, E_n^{A^+}\right) + G_{reg}\left(\rho, z, \varphi, \rho_a, z_a, \varphi_a, E_n^{A^+}\right), \quad (16) \end{aligned}$$

где расходящаяся и регуляризованная части функции Грина соответственно равны

$$\begin{aligned} G_0\left(\rho, z, \varphi, \rho_a, z_a, \varphi_a, E_n^{A^+}\right) &= -\frac{1}{2\pi^{5/2} a_n^2 \hbar \omega_n} \times \\ &\times \frac{e^{-\sqrt{2\varepsilon_{\lambda n}} \sqrt{(\rho^2 + \rho_a^2 - 2\rho\rho_a \cos(\varphi_a - \varphi) + (z - z_a)^2)}}}{\sqrt{(\rho^2 + \rho_a^2 - 2\rho\rho_a \cos(\varphi_a - \varphi) + (z - z_a)^2)}}, \quad (17) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 G_{reg}(\rho, z, \varphi, \rho_a, z_a, \varphi_a, E_n^{A^+}) = & \frac{1}{\pi^3 2^{3/2} a_n^2 \hbar \omega_n} \int_0^\infty dt e^{-t \varepsilon_{\lambda n}} \times \\
 & \times \left[\exp \left\{ \left(2e^{-t} (\rho \rho_a \cos(\varphi_a - \varphi) + (z - z_0)(z_a - z_0)) - \right. \right. \right. \\
 & \left. \left. \left. - e^{-2t} (\rho^2 + \rho_a^2 + (z - z_0)^2 + (z_a - z_0)^2) \right) / \left(a_n^2 (1 - e^{-2t}) \right) \right\} \times \right. \\
 & \times e^{\frac{(\rho^2 + \rho_a^2 + (z - z_0)^2 + (z_a - z_0)^2)}{2a_n^2}} \frac{(1 - e^{-2t})^{-3/2}}{2^{-3/2}} - \\
 & \left. \left. \left. - \frac{1}{t\sqrt{t}} e^{-\frac{(\rho^2 + \rho_a^2 - 2\rho\rho_a \cos(\varphi_a - \varphi) + (z - z_a)^2)}{2a_n^2 t}} \right] \right]. \quad (18)
 \end{aligned}$$

Пусть A^+ -центр расположен в точке с координатами (ρ_a, φ_a, z_a) . Потенциал примеси описывается в рамках модели потенциала нулевого радиуса мощностью $\gamma = 2\pi\hbar^2 / (\alpha m_h^*)$ и в цилиндрической системе координат имеет вид

$$\begin{aligned}
 V_\delta(\rho, \varphi, z; \rho_a, \varphi_a, z_a) = & \gamma \delta(\rho - \rho_a) \delta(\varphi - \varphi_a) \delta(z - z_a) \times \\
 & \times \left[1 + \frac{(\varphi \rho - \varphi_a \rho_a)}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} + (\rho - \rho_a) \frac{\partial}{\partial \rho} + (z - z_a) \frac{\partial}{\partial z} \right], \quad (19)
 \end{aligned}$$

где α определяется энергией E_i связанного состояния этого же примесного центра в массивном полупроводнике; $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака.

Такая модель, как известно [9], применима для описания A^+ -состояний, соответствующих присоединению дополнительной дырки к нейтральному акцептору. В приближении эффективной массы волновая функция $\Psi_\lambda(\rho, \varphi, z; \rho_a, \varphi_a, z_a)$ дырки, локализованной на короткодействующем потенциале примесного центра, удовлетворяет уравнению Шредингера:

$$\begin{aligned}
 (E_\lambda - \hat{H}) \Psi_\lambda(\rho, \varphi, z; \rho_a, \varphi_a, z_a) = \\
 = V_\delta(\rho, \varphi, z; \rho_a, \varphi_a, z_a) \Psi_\lambda(\rho, \varphi, z; \rho_a, \varphi_a, z_a), \quad (20)
 \end{aligned}$$

где $E_\lambda = -\hbar^2 \lambda^2 / (2m^*)$ – собственные значения оператора Гамильтона

$\hat{H}^\delta = \hat{H} + V_\delta(\rho, \varphi, z; \rho_a, \varphi_a, z_a)$, здесь $\hat{H}$ определяется выражением

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + eFz. \quad (21)$$

Уравнение Липпмана – Швингера для A^+ -состояния в КТ с параболическим потенциальным профилем во внешнем электрическом поле запишется как

$$\Psi_{\lambda}(\rho, \varphi, z; \rho_a, \varphi_a, z_a) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{+\infty} \rho_1 d\rho_1 d\varphi_1 dz_1 G(\rho, \varphi, z, \rho_1, \varphi_1, z_1; E_{\lambda}) \times \\ \times V_{\delta}(\rho_1, \varphi_1, z_1; \rho_a, \varphi_a, z_a) \Psi_{\lambda}(\rho_1, \varphi_1, z_1; \rho_a, \varphi_a, z_a). \quad (22)$$

Подставив (19) в (22), получим

$$\Psi_{\lambda}(\rho, \varphi, z; \rho_a, \varphi_a, z_a) = \\ = \gamma G(\rho, \varphi, z, \rho_a, \varphi_a, z_a; E_{\lambda}) (\hat{T} \Psi_{\lambda})(\rho_a, \varphi_a, z_a; \rho_a, \varphi_a, z_a), \quad (23)$$

где

$$(\hat{T} \Psi_{\lambda})(\rho_a, \varphi_a, z_a; \rho_a, \varphi_a, z_a) \equiv \\ \equiv \lim_{\substack{\rho \rightarrow \rho_a \\ \varphi \rightarrow \varphi_a \\ z \rightarrow z_a}} \left[1 + \frac{(\varphi \rho - \varphi_a \rho_a)}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} + (\rho - \rho_a) \frac{\partial}{\partial \rho} + (z - z_a) \frac{\partial}{\partial z} \right] \times \\ \times \Psi_{\lambda}(\rho, \varphi, z; \rho_a, \varphi_a, z_a). \quad (24)$$

Действуя оператором $\hat{T}$ на обе части соотношения (23) и учитывая (15), получим уравнение, определяющее зависимость энергии связи дырки $|E_n^{A^+}|$ от параметров КТ и квантового числа n электрона во внешнем электрическом поле F :

$$\eta_i = \sqrt{|E_n^{*A^+}|} + \frac{2}{\sqrt{\gamma_n \pi}} \int_0^{\infty} dt e^{-\frac{\gamma_n t}{2}} |E_n^{*A^+}| \times \\ \times \left[\frac{1}{2t\sqrt{2t}} - \frac{\exp\left(-\frac{\rho^{*2} + (z^* + q\gamma_n^2/2)^2}{\gamma_n} \left(\frac{1-e^{-t}}{1+e^{-t}}\right)\right)}{(1-e^{-2t})^{3/2}} \right], \quad (25)$$

где $E_n^{*A^+} = |E_n^{A^+}| / E_h = \eta_n^2 - 2\beta_n^s / R_0^* - q^2 \gamma_n^2 / 4 + 3\gamma_n^{-1}$, $\gamma_n = \sqrt{6R_0^* R_0^*} / (2\pi n)$, $q = eF a_h / E_h$, $R_0^* = R_0 / a_h$, $\eta_n = \sqrt{|E_{\lambda n}| / E_h}$, $z^* = z / a_h$, $\rho^* = \rho / a_h$, E_h – эффективная боровская энергия дырки.

На рис. 2–6 представлен результат численного анализа дисперсионного уравнения (25) для КТ на основе InSb при $|E_i| = 9,6$ мэВ и $R_0 = 45$ нм.

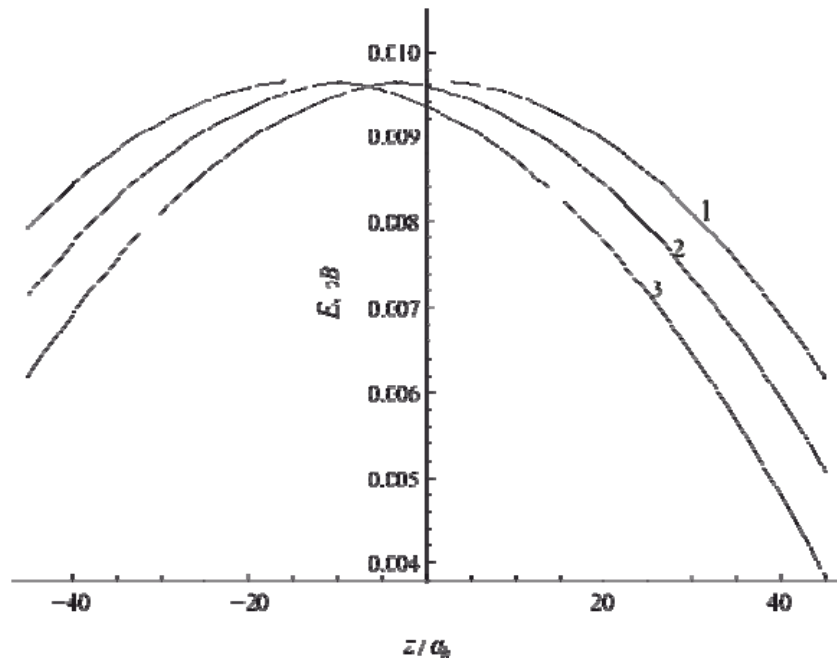


Рис. 2. Зависимость энергии связи $|E_n^{A^+}|$ от положения A^+ -центра по оси z при различных значениях напряженности внешнего электрического поля F (электрическое поле направлено вдоль оси z): кривые 1 – $F = 0$ кВ/м, 2 – $F = 15$ кВ/м, 3 – $F = 30$ кВ/м

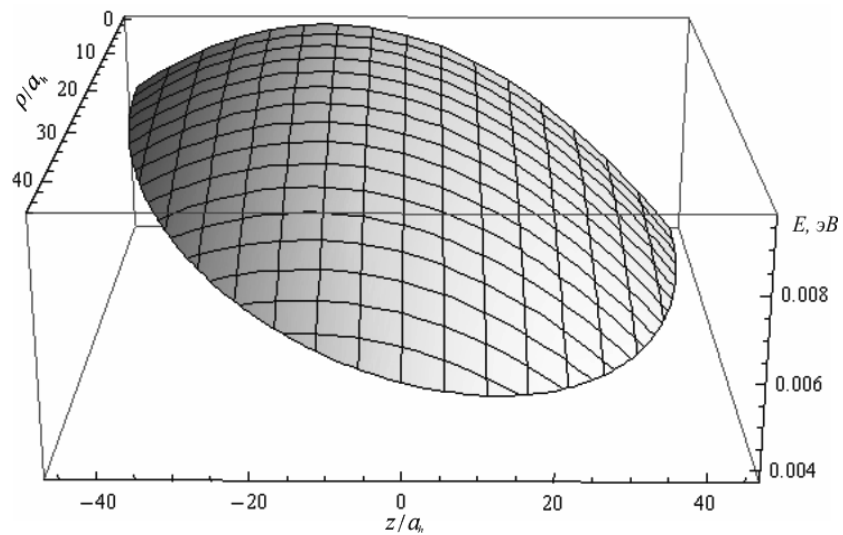


Рис. 3. Зависимость энергии связи $|E_n^{A^+}|$ от положения A^+ -центра для различных значений z и r при напряженности электрического поля $F = 30$ кВ/м

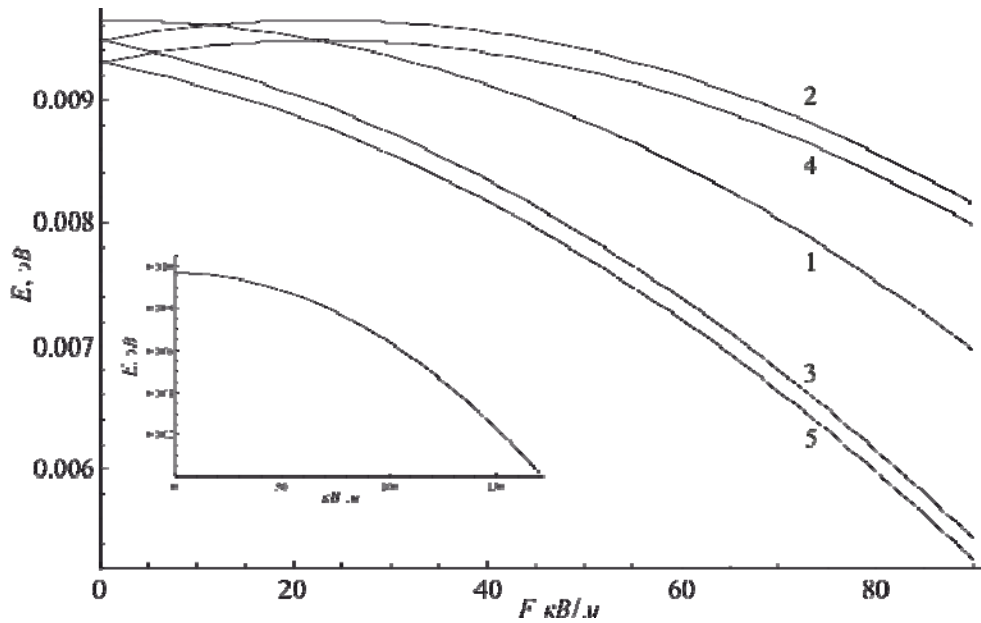


Рис. 4. Зависимость энергии связи A^+ -состояния $|E_n^{A^+}|$ от величины напряженности электрического поля F для случая, когда A^+ -центр имеет следующие координаты в КТ: кривые 1 – $z^* = 0$, $\rho^* = 0$; 2 – $z^* = -10$, $\rho^* = 0$; 3 – $z^* = 10$, $\rho^* = 0$; 4 – $z^* = 10$, $\rho^* = 10$; 5 – $z^* = 10$, $\rho^* = 10$. На вкладке представлена полевая зависимость энергии связи для централизованного расположения примеси в КТ

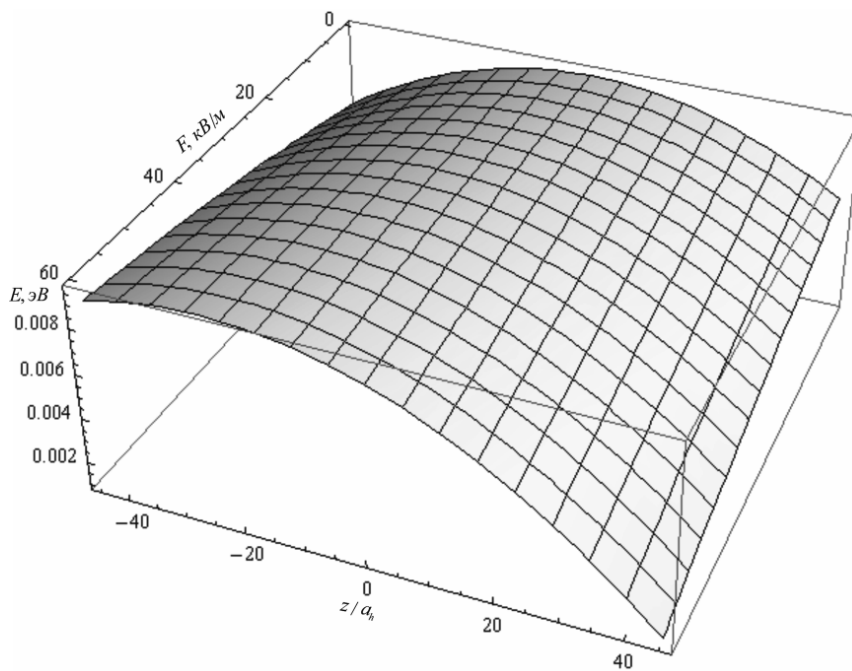


Рис. 5. Зависимость энергии связи A^+ -состояния $|E_n^{A^+}|$ от координаты z A^+ -центра и напряженности внешнего электрического поля

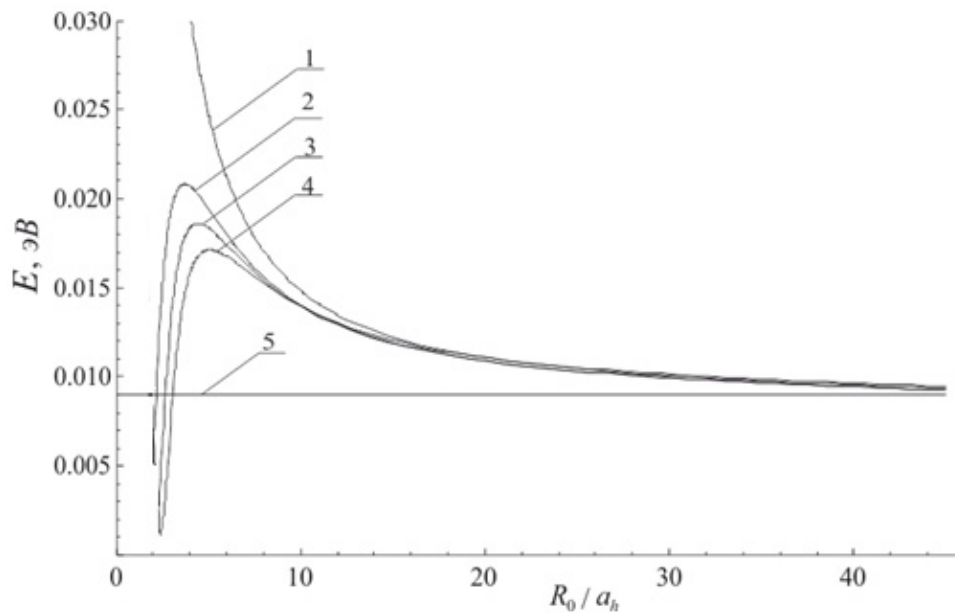


Рис. 6. Зависимость энергии связи A^+ -состояния от радиуса КТ для различных значений координат A^+ -центра при напряженности электрического поля $F = 30$ кВ/м: кривые 1 – $z^* = 0$, $\rho^* = 0$; 2 – $z^* = 0$, $\rho^* = 2$; 3 – $z^* = 2$, $\rho^* = 1$; 4 – $z^* = -2,5$, $\rho^* = 0$; 5 – энергия A^+ -центра в массивном полупроводнике

На рис. 2 показана координатная зависимость энергии связи $|E_n^{A^+}|$ A^+ -центра для различных значений напряженности внешнего электрического поля F . Как видно из рис. 2, рост напряженности внешнего электрического поля приводит к смещению максимума энергии связи A^+ -состояния, что связано с соответствующей динамикой адиабатического потенциала в электрическом поле (см. рис. 1). На рис. 3 представлена зависимость энергии связи A^+ -центра от координат z и ρ . Из рис. 3 видно, что при увеличении координаты ρ энергия связи уменьшается и достигает максимума в плоскости $\rho = 0$. При этом максимальное значение энергии связи, соответствующее положению примесного центра в точке $z = 0$, справедливо для всех значений ρ .

На рис. 4 представлена зависимость энергии связи от величины напряженности электрического поля для разных положений A^+ -центра в КТ. В центрированном случае, как видно из вкладки, при напряженности электрического поля $F > 170$ кВ/м, связанного состояния дырки, локализованной на центрированной примеси в КТ, не существует (дырка переходит под действием электрического поля на первый размерно-квантованный уровень адиабатического потенциала). При удалении примесного центра от середины КТ условия существования связанного A^+ -состояния становятся более «жесткими» (ср. кривые 3 и 5), соответственно пороговое значение напряженности электрического поля, при котором невозможно существование связанного A^+ -состояния, в этом случае уменьшается и составляет $F \approx 90$ кВ/м. Следует заметить, что на полевой зависимости энергии связи имеется ярко выражен-

ный максимум, появление которого связано с совпадением положений A^+ -центра и минимума адиабатического потенциала.

На рис. 5 представлена зависимость энергии связи A^+ -центра в зависимости от координаты по оси z и напряженности внешнего электрического поля. Из рис. 5 видно, что при увеличении напряженности электрического поля асимметрия энергии связи относительно центра КТ увеличивается более чем в 4 раза.

На рис. 6 представлена зависимость энергии связи от радиуса КТ для различных положений A^+ -центра в КТ. Характерной особенностью является немонотонный ход зависимости энергии связи в случае нецентрированного положения примесного центра. Появление максимума при определенных значениях радиуса КТ связано с совпадением координат A^+ -центра и минимума адиабатического потенциала. Отметим, что при малых радиусах КТ ($R_0 < 5$ нм для InSb) существование связанного A^+ -состояния оказывается невозможным. Также из рис. 6 видно, что энергия связи A^+ -центра в КТ значительно превосходит по величине энергию связи такого же A^+ -центра в объемном полупроводнике (кривая 5). При увеличении радиуса энергия связи примесного центра стремится к его значению в массивном полупроводнике.

Заключение

Методом потенциала нулевого радиуса в адиабатическом приближении исследована зависимость энергии связи дырки в комплексе ($A^+ + e$) от параметров КТ и квантового числа электрона n в присутствии внешнего электрического поля.

Показано, что в случае нецентрированного расположения A^+ -центра существует пороговое значение напряженности внешнего электрического поля, при котором существование связанного A^+ -состояния становится невозможным. Показано, что кривая полевой зависимости энергии связи A^+ -центра имеет характерный максимум, положение которого связано с динамикой адиабатического потенциала во внешнем электрическом поле. Найдено, что монотонный ход зависимости энергии связи A^+ -состояния от радиуса КТ нарушается при нецентрированном расположении A^+ -центра. Для определенных значений радиуса КТ энергия связи достигает максимального значения, что, по-видимому, связано с совпадением положения A^+ -центра и минимума адиабатического потенциала.

Список литературы

1. Демков Ю. Н., Островский В. Н. Метод потенциала нулевого радиуса в атомной физике. Л., 1975.
2. Кревчик В. Д., Левашов А. В. Энергетический спектр и оптические свойства комплекса квантовая точка – примесный центр // Физика и техника полупроводников. 2002. Т. 36, № 2. С. 216–220.
3. Авиркиев Н. С., Жуков А. Е., Иванов Ю. Л., Петров П. В. [и др.]. Энергетическая структура A^+ -центров в квантовых ямах // Физика и техника полупроводников. 2004. Т. 38, № 2. С. 222–225.
4. Иванов Ю. Л., Петров П. В., Тонких А. А. [и др.]. Зависимость энергии активации A^+ -центров от ширины квантовых ям в структурах GaAs/AlGaAs // Физика и техника полупроводников. 2003. Т. 37, № 9. С. 1114–1116.

5. Синявский Э. П., Канаровский У. Ю. Оптические свойства легированных квадратичных квантовых ям в постоянном электрическом поле // Физика твердого тела. 1993. Т. 35. № 6. С. 1641–1650.
6. Zhou Hai-Yang, Gu Shi-Wei, Shi Yao-Ming. Electronic and Shallow Impurity States in Semiconductor Heterostructures Under an Applied Electric Field // Communications in Theoretical Physics. 2005. Vol. 44, № 2. P. 375–381.
7. Yuan Jian-Hui, Xie Wen-Fang, He Li-Li. Shallow Donor Impurity Ground State in a GaAs/AlAs Spherical Quantum Dot within an Electric Field // Communications in Theoretical Physics. 2009. Vol. 52, № 4. P. 710–715.
8. Murillo. G., Porras-Montenegro N. Effects of an Electric Field on the Binding Energy of a Donor Impurity in a Spherical GaAs-(Ga,Al)As Quantum Dot with Parabolic Confinement // Physica Status Solidi(b). 2000. Vol. 220. P. 187–190.
9. Assaid E., Feddi E., Khaidar Metal. Electric Field Effect on the Energy of an Off-Centre Donor in Quantum Crystallites // Physica Scripta. 2001. Vol. 63. P. 329–336.
10. Ulas M., Cicek E., Senturk Dalgic S. Electric field effect on the binding energy of a non-hydrogenic donor impurity in a cylindrical cross-sectional quantum well wire // Physica Status SolidiB. 2004. Vol. 241. P. 2968–2974.
11. Niculescu E. C. Energy levels in a spherical quantum dot with parabolic confinement under electric fields // Modern Physics Letters B. 2001. Vol. 15, № 16. P. 545–554.
12. Jayam Sr. G., Navaneethakrishnan K. Effects of electric field and hydrostatic pressure on donor binding energies in a spherical quantum dot // Solid State Communications. 2003. Vol. 126. P. 681–685.
13. Эфрос Ал. Л., Эфрос А. Л. Межзонное поглощение света в полупроводниковом шаре // Физика и техника полупроводников. 1982. Т. 16, № 7. С. 1209–1214.
14. Кревчик В. Д., Левашов А. В. Энергетический спектр комплекса $A^+ + e$ в квантовой точке в адиабатическом приближении // Физика твердого тела. 2006. Т. 48, № 3. С. 548–550.
15. Покутний С. И. Квантово-размерный эффект Штарка в квазиульмерных полупроводниковых структурах // Физика и техника полупроводников. 2000. Т. 34, № 9. С. 1120–1124.

References

1. Demkov Yu.N, Ostrovskiy V.N. *Metod potentsiala nulevogo radiusa v atomnoy fizike = Zero radius potential method in atomic physics*. Leningrad, 1975. (In Russ.)
2. Krevchik V.D., Levashov A.V. Energy spectrum and optical properties of the quantum dot–impurity center complex. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov = Physics and technology of semiconductors*. 2002;36(2):216–220. (In Russ.)
3. Avirkiev N.S., Zhukov A.E., Ivanov Yu.L., Petrov P.V. [et al.]. Energy structure of A^+ centers in quantum wells. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov = Physics and technology of semiconductors*. 2004;38(2):222–225. (In Russ.)
4. Ivanov Yu.L., Petrov P.V., Tonkikh A.A. [et al.]. Dependence of the activation energy of A^+ centers on the width of quantum wells in structures GaAs/AlGaAs. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov = Physics and technology of semiconductors*. 2003;37(9):1114–1116. (In Russ.)
5. Sinyavskiy E.P., Kanarovskiy U.Yu. Optical properties of doped quadratic quantum wells in a constant electric field. *Fizika tverdogo tela = Solid state physics*. 1993;35(6):1641–1650. (In Russ.)
6. Zhou Hai-Yang, Gu Shi-Wei, Shi Yao-Ming. Electronic and Shallow Impurity States in Semiconductor Heterostructures Under an Applied Electric Field. *Communications in Theoretical Physics*. 2005;44(2):375–381.
7. Yuan Jian-Hui, Xie Wen-Fang, He Li-Li. Shallow Donor Impurity Ground State in a GaAs/AlAs Spherical Quantum Dot within an Electric Field. *Communications in Theoretical Physics*. 2009;52(4):710–715.

8. Murillo. G., Porras-Montenegro N. Effects of an Electric Field on the Binding Energy of a Donor Impurity in a Spherical GaAs-(Ga,Al)As Quantum Dot with Parabolic Confinement. *Physica Status Solidi(b)*. 2000;220:187–190.
9. Assaid E., Feddi E., Khaidar Metal. Electric Field Effect on the Energy of an Off-Centre Donor in Quantum Crystallites. *Physica Scripta*. 2001;63:329–336.
10. Ulas M., Sicek E., Senturk Dalgic S. Electric field effect on the binding energy of a non-hydrogenic donor impurity in a cylindrical cross-sectional quantum well wire. *Physica Status SolidiB*. 2004;241:2968–2974.
11. Niculescu E.C. Energy levels in a spherical quantum dot with parabolic confinement under electric fields. *Modern Physics Letters B*. 2001;15(16):545–554.
12. Jayam Sr.G., Navaneethakrishnan K. Effects of electric field and hydrostatic pressure on donor binding energies in a spherical quantum dot. *Solid State Communications*. 2003;126:681–685.
13. Efros A.L., Efros A.L. Interband absorption of light in a semiconductor ball. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov = Physics and technology of semiconductors*. 1982;16(7):1209–1214. (In Russ.)
14. Krevchik V.D., Levashov A.V. Energy spectrum of the $A^+ + e$ complex in a quantum dot in the adiabatic approximation. *Fizika tverdogo tela = Solid state physics*. 2006;48(3):548–550. (In Russ.)
15. Pokutniy S.I. Quantum size Stark effect in quasi-zero-dimensional semiconductor structures. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov = Physics and technology of semiconductors*. 2000;34(9):1120–1124. (In Russ.)

Информация об авторах / Information about the authors

Александр Владимирович Левашов

кандидат физико-математических наук,
доцент кафедры физики,
Пензенский государственный
университет (Россия, г. Пенза,
ул. Красная, 40)

E-mail: physics@pnzgu.ru

Aleksandr V. Levashov

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor
of the sub-department of physics,
Penza State University (40 Krasnaya
street, Penza, Russia)

Владимир Дмитриевич Кревчик

доктор физико-математических наук,
профессор, декан факультета
информационных технологий
и электроники, Пензенский
государственный университет
(Россия, г. Пенза, ул. Красная, 40)

E-mail: physics@pnzgu.ru

Vladimir D. Krevchik

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, dean of the faculty
of information technology and electronics,
Penza State University (40 Krasnaya
street, Penza, Russia)

Михаил Борисович Семенов

доктор физико-математических наук,
профессор, заведующий кафедрой
физики, Пензенский государственный
университет (Россия,
г. Пенза, ул. Красная, 40)

E-mail: physics@pnzgu.ru

Mikhail B. Semenov

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, head of the
sub-department of physics, Penza
State University (40 Krasnaya street,
Penza, Russia)

Алексей Викторович Разумов

кандидат физико-математических наук,
доцент, доцент кафедры общей физики
и методики обучения физике,
Пензенский государственный
университет (Россия, г. Пенза,
ул. Красная, 40)

E-mail: physics@pnzgu.ru

Aleksey V. Razumov

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor, associate
professor of the sub-department of general
physics and physics teaching methods,
Penza State University (40 Krasnaya
street, Penza, Russia)

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов / The authors declare no conflicts of interests.

Поступила в редакцию / Received 20.01.2022

Поступила после рецензирования и доработки / Revised 10.02.2022

Принята к публикации / Accepted 28.02.2022