

Реберный вклад в электронную энергию ограниченных микрокристаллов

М. В. Энтин¹⁾, М. М. Махмудиан

Институт физики полупроводников Сибирского отделения РАН
630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 9 января 2001 г.

Поверхностная часть энергии электронов в малых металлических или полупроводниковых частицах содержит вклад, обусловленный наличием ребер и вершин у кристаллитов. В приближении квадратичного электронного энергетического спектра вычислена величина реберного вклада в зависимости от величины двугранного угла и ориентации ребра по отношению к осям тензора эффективных масс.

PACS: 72.20.Ee, 72.80.Tm

Квантовые точки с большим числом электронов являются промежуточным объектом между квантовым и классическим пределами. С одной стороны, их размер уже велик по сравнению с длиной волны электрона. С другой стороны, квантование состояний сказывается на транспортных и термодинамических свойствах системы.

В вырожденной электронной системе вклад поверхности в термодинамику малой частицы определяется малым отношением фермиевской длины волны электрона $1/k_F$ к ее размеру L . В работах Нагаева и др. (см. обзор [1] и ссылки в нем) было показано, что наличие поверхности приводит к регулярным поправкам по этому параметру к химическому потенциалу электронов.

Наличие поверхностного вклада в энергию электронного газа приводит к разнообразным физическим эффектам. В частности, оно влияет на поверхностное натяжение в малых частицах и, следовательно, на их равновесную форму. Установление равновесия между электронным газом в разных по размеру или форме микрочастицах сопровождается их спонтанным зарядением [1]. Как показано в [2], вследствие дискретности заряда химический потенциал в микрочастицах выравнивается не полностью, что приводит к бесщелевому диэлектрическому состоянию системы гранул – бесщелевому хаббардовскому диэлектрику.

Помимо поверхностного вклада в энергию, в ограниченных кристаллитах имеются вклады, обусловленные их ребрами и вершинами. Целью настоящей работы является нахождение реберного вклада в химический потенциал трех- и двумерных ограниченных образцов.

Вначале рассмотрим трехмерный газ свободных электронов, ограниченный двугранным углом $0 < \varphi < \phi$, $r < R$, на поверхности которого волновая функция ψ удовлетворяет условиям²⁾ $\psi = 0$. Нам необходимо вычислить вклад в Ω -потенциал, обусловленный окрестностью ребра $r = 0$. Для этого рассмотрим плотность Ω -потенциала при нулевой температуре

$$\omega(r, \varphi) = - \sum (\mu - \varepsilon_{n,m} - k_z^2/2m_e) |\psi_{n,m}(z, r, \varphi)|^2. \quad (1)$$

Здесь $\varepsilon_{n,m}$ – уровень энергии электрона с главным n и магнитным m квантовыми числами, k_z – импульс вдоль ребра, m_e – электронная масса, μ – химический потенциал. Ось z направлена вдоль ребра.

Устремим радиус R сектора к бесконечности. В этом пределе $\omega(r, \varphi)$ перестает зависеть от размера сектора. В то же время эта величина, очевидно, обращается в ноль в окрестности границ и ребра на расстояниях порядка фермиевской длины волны электрона, а вдали от границ переходит в постоянную – объемное значение плотности Ω -потенциала электронного газа. Чтобы выделить вклад ребра в Ω -потенциал, проинтегрируем ω по области $r < r_0$, примыкающей к ребру. Результат содержит объемное слагаемое, пропорциональное объему этой области, поверхностный вклад, пропорциональный поверхности сектора, и не зависящий от r_0 вклад, обусловленный ребром:

²⁾ В принципе, задачу можно решить предельным переходом к большому объему из любой задачи с разделяющимися переменными. Ограничивающая поверхность должна содержать двугранный угол.

¹⁾ e-mail: entin@isp.nsc.ru

$$\begin{aligned}\Omega_r &= \int_0^{L_z} dz \int_0^{r_0} r dr \int_0^\phi d\varphi \omega = \\ &= \omega_3 L_z \phi r_0^2 / 2 + \omega_2 L_z r_0 + \omega_1 L_z + o(1).\end{aligned}\quad (2)$$

С учетом того, что при $\phi = \pi$ необходимый нам реберный вклад отсутствует, его можно найти при помощи предельного перехода

$$\begin{aligned}\omega_1 &= \frac{1}{L_z} \left[\left(\Omega_r - r_0^2 \lim_{r_0 \rightarrow \infty} \left[\frac{\Omega_r}{r_0^2} \right] \right)_{\phi} - \right. \\ &\quad \left. - \left(\Omega_r - r_0^2 \lim_{r_0 \rightarrow \infty} \left[\frac{\Omega_r}{r_0^2} \right] \right)_{\phi=\pi} \right].\end{aligned}\quad (3)$$

Волновая функция, удовлетворяющая граничному условию, имеет вид

$$\psi_{n,m}(z, r, \varphi) = C \exp(ik_z z) J_\nu(kr) \sin(\nu\varphi), \quad \nu = \pi m / \phi. \quad (4)$$

Нормировочный коэффициент C и уровни энергии определяются, если ограничить систему на большом расстоянии $R \gg r$. Используя асимптотику функций Бесселя на больших расстояниях

$$J_\nu(kr) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \cos(kr - \pi\nu/2 - \pi/4),$$

находим в главном порядке по R :

$$C = \sqrt{2\pi k / \phi R}, \quad \pi n = kR. \quad (5)$$

После перехода от суммы по n к интегралу получаем

$$\begin{aligned}\Omega_r &= -\frac{L_z}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \int_0^{\infty} k dk \int_0^{r_0} r dr \times \\ &\times \sum_{m=1}^{\infty} J_{\frac{\pi m}{\phi}}^2(kr) \left(\mu - \frac{k^2 + k_z^2}{2m_e} \right) \theta \left(\mu - \frac{k^2 + k_z^2}{2m_e} \right).\end{aligned}\quad (6)$$

Выражение для Ω_r после небольших преобразований примет вид

$$\begin{aligned}\Omega_r &= \frac{1}{m_e r_0^2} \frac{L_z}{\pi} \int_0^{k_F} dk_z u^4 \times \\ &\times \int_0^1 x dx [\ln x + \frac{1}{2}(1-x^2)] \sum_{m=1}^{\infty} J_{\frac{\pi m}{\phi}}^2(ux).\end{aligned}\quad (7)$$

Здесь $u = (k_F^2 - k_z^2)^{1/2} r_0$.

Сумму квадратов функций Бесселя удастся свернуть для углов $\phi = 2\pi$ и $\phi = \pi/j$, где j – целое число. Используя формулу 5.7.17.8. из [3], получаем:

$$\begin{aligned}\sum_{m=1}^{\infty} J_{jm}^2(t) &= \frac{1}{j} \sum_{m=1}^{[\frac{j}{2}]} J_0 \left(2t \sin \left(\frac{m\pi}{j} \right) \right) + \\ &+ \frac{1}{2j} - \frac{1}{2} J_0^2(t) - \frac{1}{4j} (1 + (-1)^j) J_0(2t).\end{aligned}\quad (8)$$

В частности, при $\phi = \pi$

$$\sum_{m=1}^{\infty} J_m^2(t) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} J_0^2(t), \quad (9)$$

откуда по асимптотике при $r \rightarrow \infty$ находим известные значения объемного и поверхностного [1, 2] Ω -потенциала:

$$\omega_3 = -\frac{k_F^5}{15\pi^2 m_e}, \quad \omega_2 = \frac{k_F^4}{32\pi m_e}. \quad (10)$$

Выражение для ω_1 получается из (3), (7) – (9) интегрированием по x в первом не исчезающем квадратичном порядке по u :

$$\begin{aligned}\omega_1(\phi) &= -\frac{\phi}{(2\pi)^2 m_e r_0^2} \times \\ &\times \int_0^{k_F} dk_z u^2 \left[\sum_{m=1}^{[\frac{j}{2}]} \frac{1}{\sin^2(m\phi)} - \frac{1}{4} (1 + (-1)^j) \right].\end{aligned}\quad (11)$$

Суммируя по m , окончательно получаем

$$\omega_1(\phi) = -\frac{k_F^3}{36\pi m_e} \left(\frac{\pi}{\phi} - \frac{\phi}{\pi} \right). \quad (12)$$

Как видно, при угле $\phi = \pi$ имеем $\omega_1(\pi) = 0$. Для прямого двугранного угла $\omega_1(\pi/2) = -k_F^3/24\pi m_e$.

Угол $\phi = 2\pi$ соответствует трещине в кристалле. Для этого угла из (7) с помощью формулы 5.7.11.11. из [3] находим $\omega_1(2\pi) = k_F^3/24\pi m_e$. Это выражение также удовлетворяет формуле (12), выведенной только для углов $\phi = \pi/j$.

Численный расчет для произвольных углов показывает согласие с формулой (12) с высокой точностью, что, по-видимому, свидетельствует о ее общности.

Согласно (12), при углах больше π величина ω_1 отрицательна и положительна при углах, меньших π . Физически изменение знака ω_1 объясняется теми же факторами, что и положительный знак поверхностного вклада в энергию. Из-за нулевого граничного условия приграничная область кристалла обеднена электронами. Как следствие, область, занятая электронами, уменьшается, что повышает энергию электронного газа при той же средней плотности. Если границу согнуть в угол при неизменной ее площади, то объем обедненной области уменьшается, если $\phi < \pi$, и увеличивается, если $\phi > \pi$, что приводит,

соответственно, к понижению и повышению энергии электронного газа.

С помощью (12) число электронов в кристаллите с объемом V , площадью поверхности S и ребрами с углами ϕ_n и длинами L_n выражается через химический потенциал:

$$N = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = \frac{(2m_e \mu)^{\frac{3}{2}} V}{3\pi^2} - \frac{m_e \mu S}{4\pi} + \frac{(2m_e \mu)^{\frac{1}{2}}}{12\pi} \sum_n L_n \left(\frac{\pi}{\phi_n} - \frac{\phi_n}{\pi} \right). \quad (13)$$

Выражение для реберного вклада в энергию допускает легкое обобщение на случай анизотропно-квадратичного энергетического спектра $\varepsilon(k) = \sum k_i^2/2m_i$. Рассмотрим частный случай, когда ребро совпадает с осью (3) эллипсоида эффективных масс. Пусть α и β – углы граней кристаллита с плоскостью xz . С помощью аффинного преобразования $x'_i = x_i(m_i/m_e)^{1/2}$, где $m_e = (m_1 m_2 m_3)^{1/3}$, уравнение Шредингера превращается в изотропное, для которого справедливо все предыдущее рассмотрение. При этом преобразованный угол между гранями, входящий в предыдущие формулы, определяется соотношением

$$\tan \phi = \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} \frac{\tan \alpha - \tan \beta}{1 + \frac{m_2}{m_1} \tan \alpha \tan \beta}, \quad (14)$$

а длина ребра L_n заменяется на $L_n \sqrt{m_3/m_e}$.

Формула (12) была выведена для ребра трехмерного кристалла. Аналогичные задачи возникают и при рассмотрении ограниченных двумерных систем, в которых движение по оси z заковано. Переход к двумерным формулам можно произвести, исклю-

чив интегрирование по k_z и множитель $L_z/2\pi$ в промежуточных формулах. В результате энергия угла двумерной площадки имеет вид

$$\omega_1(\phi) = -\frac{k_F^2}{24m_e} \left(\frac{\pi}{\phi} - \frac{\phi}{\pi} \right). \quad (15)$$

Компьютерные расчеты энергетических состояний в многоэлектронных квантовых точках являются достаточно сложной проблемой из-за экспоненциального увеличения числа энергетических состояний, включаемых в матрицу гамильтониана с ростом числа электронов. В то же время рассмотренный подход, основанный на разложении термодинамических величин по степеням размера, позволяет получить простые оценки, не прибегая к сложным вычислениям. В частности, он позволяет легко оценивать числа заполнения так называемых самоорганизованных квантовых точек одного полупроводника на поверхности другого, которые обычно представляют из себя ограниченные пирамидки (см., например, [4]).

Работа поддержана грантами Российского фонда фундаментальных исследований # 00-02-17658 и Государственной программой Российской Федерации “Физика твердотельных наноструктур”.

1. Э. Л. Нагаев, УФН **162**, 49 (1992).
2. Э. М. Баскин, М. В. Энтин, Письма ЖЭТФ **70**, 511 (1999).
3. А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды. Специальные функции*, М.: Наука, 1983.
4. L. Chuan-Pu, J. M. Gibson, D. G. Cahill et al., Phys. Rev. Lett. **84**, 1958 (2000).