

ВЛАСТИВОСТІ СПЕКТРА КВАЗІЧАСТИНОК ТА ПОВНОГО НАБОРУ ХВИЛЬОВИХ ФУНКЦІЙ У КОМБІНОВАНІЙ НАНОГЕТЕРОСИСТЕМІ

У наближенні ефективних мас і прямокутного потенціалу розраховано енергетичні спектри електронів у складній комбінованій напівпровідниковій наногетеросистемі, що складається з циліндричного напівпровідникового квантового дроту, який перпендикулярно перетинає плоску квантову яму, і розташовані в зовнішньому середовищі. Показано, що електрон у такій системі характеризується п'ятьма квантовими числами, що пов'язано із наявністю п'яти ступеней вільності для квазічастинки.

The electron energy spectra in the combined semiconductor nanoheterosystem consisting of cylindrical semiconductor quantum wire perpendicularly crossing the plane quantum well placed into the external medium are calculated within the effective mass approximation and rectangular potential method. It is shown that the electron in such system is characterized by five quantum numbers due to the five powers of freedom for the quasiparticle. The dependences of quasiparticles energies on the radius of quantum wire and width of quantum well are studied in details.

В останні роки багато теоретичних та експериментальних праць присвячено вивченню різного типу напівпровідникових гетеросистем. Це зумовлено перспективами їх застосування в наноелектроніці та прецизійній лазерній техніці [1]. Для того, щоб цілеспрямовано отримувати необхідні властивості об'єктів нового типу, потрібно вивчити фізичні явища, які в них відбуваються. Отже, потрібна теорія спектрів квазічастинок, а також теорія їхньої взаємодії як між собою, так і з різними зовнішніми полями в різних наногетеросистемах. Теорія електронів, дірок, екситонів, фононів та взаємодії цих квазічастинок між собою, а також з електричним і магнітним полями у квантових точках (КТ) [2], квантових дротах (КД) [3], квантових ямах (КЯ) [4] інтенсивно розроблялася останнє десятиліття й досягла не лише якісного, але й непоганого кількісного узгодження з експериментом. Це стосується багаточисельних відкритих і закритих систем, в основному, сферичної та циліндричної симетрії [5]. Оскільки технологія виготовлення різних наносистем швидко прогресує, то вже існують і детально вивчаються експериментально створені досить складні комбіновані наноконструкції, які містять різноманітні просторові з'єднання квантових точок, квантових дротів і квантових ям. Дослідження таких систем важливе з огляду на

можливість їх використання в приладах фізичної, біомедичної та оптоелектроніки [6]. Теорія спектрів квазічастинок у таких системах наразі не існує взагалі, оскільки вона достатньо складна для математичного опису. Тому цікаво й важливо дослідити особливості поведінки "основних" квазічастинок (електронів, дірок, екситонів) хоча б у порівняно простих системах. Одна з таких систем – циліндричний напівпровідниковий квантовий дріт, який перетинає плоску квантову яму. Теорії фізичних явищ у таких системах ще немає, адже відсутня навіть теорія спектрів та взаємодії основних квазічасток між собою та з полями в цій системі.

Створення зазначеної квантово-механічної теорії є актуальною задачею, хоча вона апріорі зустрінеється з математичними труднощами, зумовленими необхідністю розв'язування задачі Шредінгера зі складними граничними умовами.

Мета даної роботи полягає в побудові теорії спектра електрона в простій комбінованій наногетеросистемі, що складається з циліндричного КД, який перпендикулярно перетинає плоску КЯ у зовнішньому середовищі. Як буде показано, висока симетрія системи дозволяє розв'язати цю задачу і вперше дослідити в ній деякі особливості спектрів електронів і дірок.

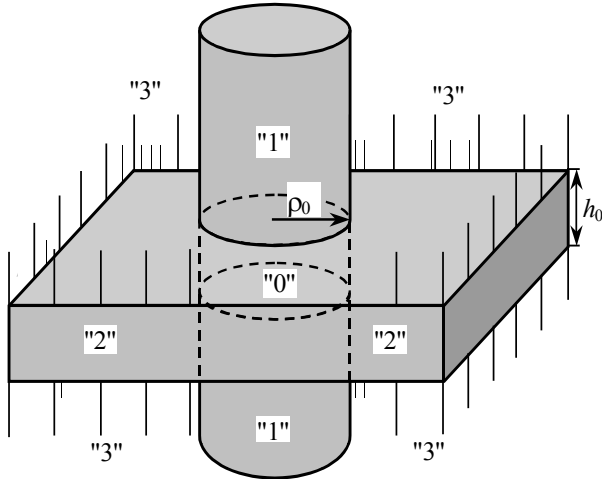


Рис. 1. Геометрична схема квантового дроту, що перетинає плоску квантову яму в зовнішньому середовищі

Розглядається вміщена в середовище "3" наногетеросистема, що складається з циліндричного напівпровідникового квантового дроту "1" радіуса ρ_0 , який перпендикулярно перетинає безмежну плоску квантову яму "2" шириною h_0 , утворюючи циліндричну квантову точку "0" (рис.1). Ефективні маси і потенціальні енергії електрона в різних областях наногетеросистеми вважаються відомими і такими, якими квазічастинка характеризується в масивних аналогах нанокристалів.

Енергетичний спектр і хвильові функції квазічастинки визначаються рівняннями Шредінгера, яке в доцільній до цього випадку циліндричній системі координат матиме вигляд

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(\rho, z) \right] \psi(\rho, \varphi, z) = E \psi(\rho, \varphi, z). \quad (1)$$

Враховуючи симетрію задачі, розв'язок рівняння (1) зручно шукати у вигляді:

$$\psi(\vec{r}) = \begin{cases} \psi_0(\rho, \varphi, z) = A_0 J_m(\chi_0 \rho) e^{im\varphi} \begin{pmatrix} \sin(k_0 z) \\ \cos(k_0 z) \end{pmatrix}, \\ \psi_1(\rho, \varphi, z) = A_1 J_m(\chi_1 \rho) e^{im\varphi} e^{-k_1 z}, \\ \psi_2(\rho, \varphi, z) = A_2 K_m(\chi_2 \rho) e^{im\varphi} \begin{pmatrix} \sin(k_2 z) \\ \cos(k_2 z) \end{pmatrix}, \end{cases} \quad (2)$$

де A_0, A_1, A_2 – деякі константи, $J_m(\rho)$ і $K_m(\rho)$ – функція Беселя й Макдональда цілого порядку, m – магнітне квантове число,

$$\chi_0 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} \left(E - \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_0} \right)},$$

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_1}{\hbar^2} \left(U_1 - E + \frac{\hbar^2 \chi_1^2}{2m_1} \right)}, \quad (3)$$

$$\chi_2 = \sqrt{\frac{2m_2}{\hbar^2} \left(U_1 - E + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2} \right)},$$

k_0, χ_1, k_2 – поки що невідомі величини.

Використовуючи граничні умови неперервності хвильової функції й потоку її густини ймовірності на всіх межах поділу між середовищами наногетеросистеми

$$\begin{aligned} \psi_0(\rho, \varphi, z) \Big|_{\rho=\rho_0} &= \psi_2(\rho, \varphi, z) \Big|_{\rho=\rho_0}, \\ \frac{1}{m_0} \frac{\partial \psi_0(\rho, \varphi, z)}{\partial \rho} \Big|_{\rho=\rho_0} &= \frac{1}{m_2} \frac{\partial \psi_2(\rho, \varphi, z)}{\partial \rho} \Big|_{\rho=\rho_0}, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\psi_0(\rho, \varphi, z) \Big|_{z=h_0/2} = \psi_1(\rho, \varphi, z) \Big|_{z=h_0/2},$$

$$\frac{1}{m_0} \frac{\partial \psi_0(\rho, \varphi, z)}{\partial \rho} \Big|_{z=h_0/2} = \frac{1}{m_1} \frac{\partial \psi_1(\rho, \varphi, z)}{\partial \rho} \Big|_{z=h_0/2},$$

а також умови рівності нулю хвильових функцій ψ_1 і ψ_2 на межі із зовнішнім середовищем (внаслідок безмежного потенціального бар'єра)

$$\psi_1(\rho, \varphi, z) \Big|_{\rho=\rho_0} = 0, \quad \psi_2(\rho, \varphi, z) \Big|_{z=h_0/2} = 0, \quad (5)$$

з урахуванням умови нормування

$$\iiint |\psi(r)|^2 dr = 1, \quad (6)$$

отримується повна система рівнянь, з якої знаходяться хвильові функції. З умови нетривіальності розв'язку системи рівнянь відносно коефіцієнтів A_0, A_1, A_2 , отримується система трансцендентних рівнянь

$$\begin{cases} \frac{k_0}{m_0} \begin{pmatrix} \text{ctg} \left(k_0 \frac{h_0}{2} \right) \\ -\text{tg} \left(k_0 \frac{h_0}{2} \right) \end{pmatrix} = -\frac{k_1}{m_1}, \\ \frac{\chi_0}{m_0} \frac{J'_m(\chi_0 \rho_0)}{J_m(\chi_0 \rho_0)} = \frac{\chi_2}{m_2} \frac{K'_m(\chi_2 \rho_0)}{K_m(\chi_2 \rho_0)}, \end{cases} \quad (7)$$

яка і визначає енергетичний спектр електрона E при фіксованому значенні k_0 .

Числові розрахунки енергетичного спектра електронів проводилися для наногетеросистеми із напівпровідників β -HgS (середовище "0") і β -CdS (середовища "1", "2"). Результати розрахунків залежностей енергій електрона $E_{n_z n_\rho m \rho_z \rho_\rho}^e$ від радіуса квантового дроту ρ_0 при фіксованій висоті циліндричної КТ $h_0=15 a_{\text{HgS}}$ і фіксованих

квантових числах $n_z=1, n_\rho=1, m=0$ зображено на рис. 2а, а залежність від висоти циліндричної КТ h_0 при $\rho_0=10 a_{\text{HgS}}$ – на рис. 2б. З рис. 2 видно, що зі збільшенням ρ_0 всі енергетичні рівні $E_{110p_z p_\rho}^e$ зміщуються в область менших енергій. За фіксованих $n_z=1, n_\rho=1, m=0$ спектральні рівні утворюють групи за квантовим числом p_z , в які входять рівні з різним значенням квантового числа p_ρ . Отже, основному енергетичному рівню відповідають квантові числа $n_z=1, n_\rho=1, m=0, p_z=1, p_\rho=1$. Енергії групи рівнів із $p_z=2$ і $p_\rho=1$ зі збільшенням радіуса квантового дроту ρ_0 зменшуються і, як і повинно бути в граничному випадку ($\rho_0 \gg h_0$), наближаються до значень енергій, що відповідають двом енергетичним станам електрона $E_{n_z=1,2, m=0}^{e(h)}$ у плоскій КЯ безмежного радіуса ($\rho_0 \rightarrow \infty$) $\beta\text{-HgS}$, розташованій у середовищі $\beta\text{-CdS}$.

З рис. 2 видно, що поведінка енергетичних рівнів електрона при збільшенні висоти циліндричної КТ подібна до тієї, що була при збільшенні радіуса квантового дроту, але змінюється ієрархія енергетичних рівнів.

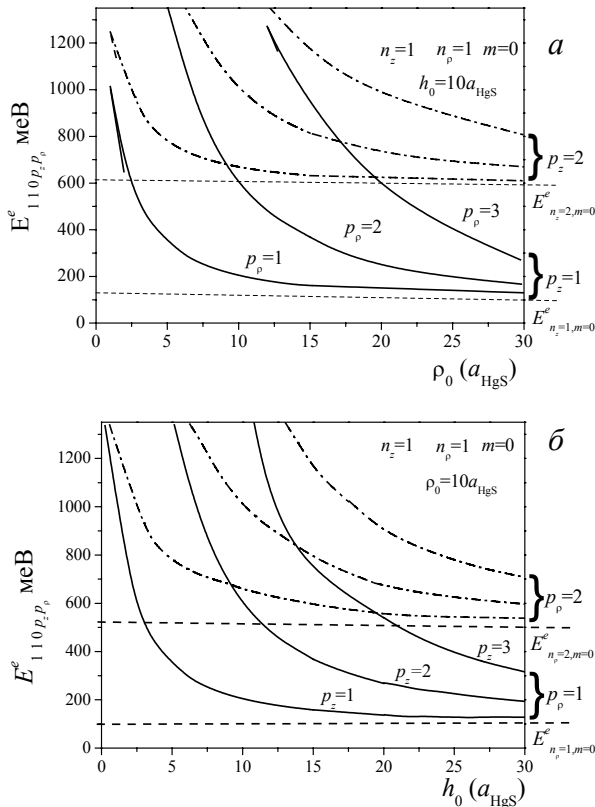


Рис. 2. Залежність енергетичних рівнів електрона від радіуса циліндричного КД і циліндричної КТ

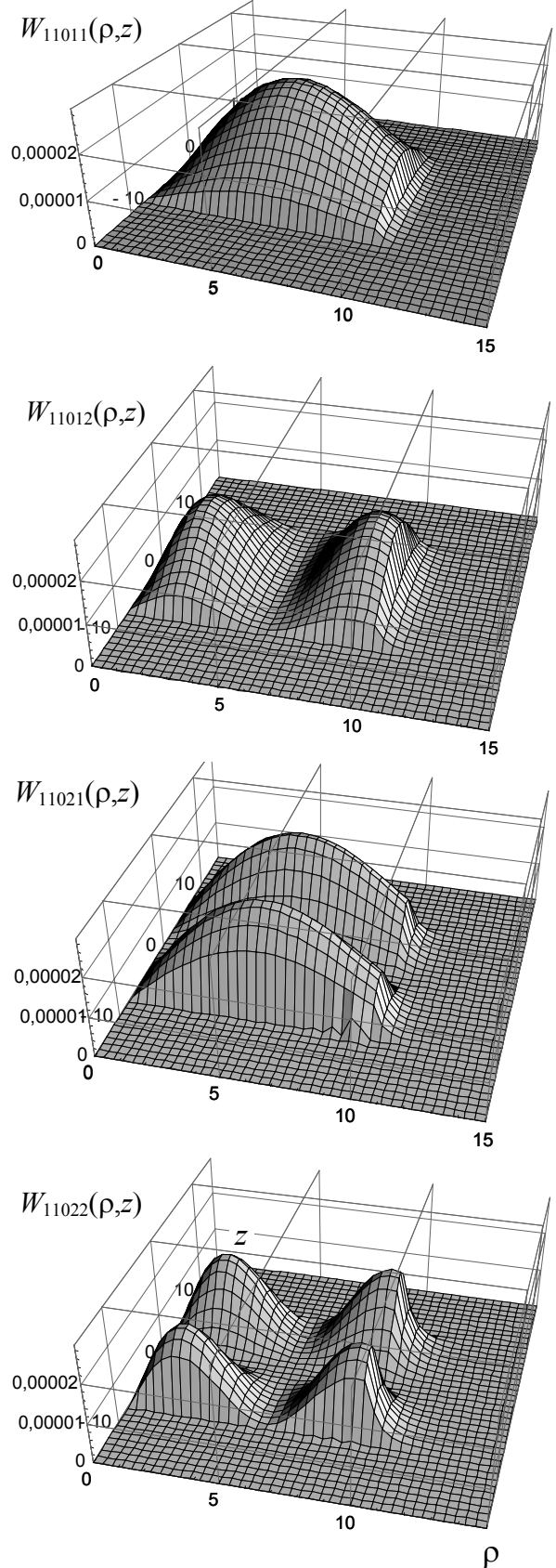


Рис. 3. Залежності густин ймовірностей знаходження електрона у кількох станах від змінних ρ і z .

Наявність п'яти квантових чисел n_z , n_ρ , m , p_z , p_ρ , які характеризують стан електрона, зумовлена тим, що ця квазічастинка може одночасно перебувати у всіх областях простору досліджуваної наногетеросистеми (і в дроті, і в плоскій квантовій ямі), крім області "3" (рис. 1), а отже, характеризується п'ятьма степенями вільності, оскільки кутова аксіальна змінна є спільною для обох підсистем. Це підтверджується і поведінкою густини ймовірності знаходження електрона $W = \rho |\psi(\rho, z)|^2$, залежність якої від змінних z і ρ показано на рис. 3.

З рис. 3а видно, що W_{11011} має один максимум, як випливає із загальної теорії локалізованих станів квазічастинок. Рис. 3б відповідає першому збудженому енергетичному рівню з квантовими числами $n_z=1$, $n_\rho=1$, $m=0$, $p_z=1$, $p_\rho=2$. На рис. 3б густина ймовірності має два максимуми вздовж напрямку ρ і один – вздовж напрямку z . Рис. 3в описує густину ймовірності перебування електрона на третьому збудженому рівні з квантовими числами $n_z=1$, $n_\rho=1$, $m=0$, $p_z=2$, $p_\rho=1$. Відповідно W_{11021} має два максимуми вздовж напрямку z (хвильова функція симетрична щодо заміни z на $-z$) і один – вздовж напрямку ρ . Нарешті, рис. 3г відповідає квантовим числам $n_z=1$, $n_\rho=1$, $m=0$, $p_z=2$, $p_\rho=2$ і густина ймовірності має по два максимуми вздовж обох напрямків.

Підсумовуючи отримані результати, зазначимо, що розвинена в роботі теорія не лише описує властивості спектрів електронів і дірок, але й на базі знайдених хвильових функцій цих квазічастинок дозволяє побудувати теорію екситонного спектра, а також досліджувати взаємодію цих квазічастинок із фононами.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Алфёров Ж.И. История и будущее полупроводниковых гетероструктур // ФТП. – 1998. – **32**. – №1. – С.3-18.
2. Wang X.F., Lei X.L. Polar-optic phonons and high-field electron transport in cylindrical GaAs/AlAs quantum wires // Phys.Rev.B. – 1994. – **49**, No.7. – P.4780-4789.
3. Mori N., Ando T. Electron-optical-phonon interaction in single and double heterostructures // Phys.Rev.B. – 1989. – **40**, No.9. – P.6175-618,
4. Siegel R.W. Assembling Materials From Nanoscale Building Blocks // Proc. E-MRS. – 2004. – P. 24-25.
5. Tkach M., Holovatsky V., Voitsekhivska O. Electron and hole quasistationary states in opened cylindrical quantum wire // Physica E: Low dimensional systems and Nanostructures. – 2001. – **11**. – P.17-26.