ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 10, № 3 (2006) с. 227–233
JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 10, No. 3 (2006) p. 227–233

ВЛАСТИВОСТІ СПЕКТРА ЕЛЕКТРОНІВ І ДІРОК У КВАНТОВОМУ ДРОТІ, ЩО ПЕРЕТИНАЄ ПЛОСКУ КВАНТОВУ ЯМУ В ЗОВНІШНЬОМУ СЕРЕДОВИЩІ

М. В. Ткач, О. М. Маханець, А. М. Грищук
Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича,
вул. Коцюбинського, 2, Чернівці, 58012
(Отримано 17 січня 2006 р.; в остаточному вигляді — 10 листопада 2006 р.)

У наближенні ефективних мас і прямокутного потенціялу розраховано енерґетичні спектри та хвильові функції електронів і дірок у складній комбінованій напівпровідниковій наногетеросистемі, що перебуває в зовнішньому середовищі і складається з циліндричного напівпровідникового квантового дроту, який перпендикулярно перетинає плоску квантову яму. Докладно досліджено залежності енерґій квазічастинок від радіуса квантового дроту й ширини квантової ями.

Ключові слова: циліндрична квантова точка, циліндричний квантовий дріт, плоска квантова яма, енерґетичний спектр, хвильова функція.

PACS number(s): 73.21.Fg, 73.21.Hb, 73.21.La

I. ВСТУП

Останніми роками багато теоретичних й експериментальних робіт присвячено вивченню різного типу напівпровідникових гетеросистем. Це зумовлено перспективами їх застосування в наноелектроніці та прецизійній лазерній техніці [1,2].

Для того, щоб цілеспрямовано отримувати необхідні властивості об'єктів нового типу, слід вивчити фізичні явища, що в них відбуваються. Для цього потрібна теорія спектрів квазічастинок та їхньої взаємодії між собою і з різними зовнішніми полями в різних наногетеросистемах. Теорію електронів, дірок, екситонів, фононів та взаємодії цих квазічастинок між собою, а також з електричним і магнетним полями у квантових точках (КТ) [3–5], квантових дротах (КД) [6,7], квантових ямах (КЯ) [8,9] інтенсивно розробляли останнім десятиліттям і досягли не лише якісного, але й непоганого кількісного узгодження з експериментом. Це стосується багатошарових відкритих і закритих систем, в основному, сферичної та циліндричної симетрій [10–12].

Оскільки технологія виготовлення різних наносистем проґресує дуже швидко, 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 у зв'язку з можливістю їх використання у приладах фізичної, біомедичної та оптоелектроніки [13]. Теорії спектрів квазічастинок у таких системах поки що не існує взагалі, оскільки вони досить складні для математичного опису. Тому цікаво і важливо дослідити особливості поведінки "основних" квазічастинок (електронів, дірок, екситонів) хоча б у порівняно простих системах.

Однією з таких систем є циліндричний напівпровідниковий квантовий дріт, що перетинає плоску квантову яму. Теорії фізичних явищ у таких системах ще немає, бо відсутня навіть теорія спектрів та взаємодії основних квазічасток між собою і з полями в цих системах.

Створення такої квантовомеханічної теорії є актуальною задачею, хоча вона апріорі матиме очевидні математичні труднощі, зумовлені необхідністю розв'язування задачі Шредінґера зі складними граничними умовами.

Метою цієї роботи є побудова теорії спектра електрона й дірки в достатньо простій комбінований наногетеросистемі, що складається з циліндричного КД, який перпендикулярно перетинає плоску КЯ в зовнішньому середовищі. Як буде показано, висока симетрія системи дає змогу розв'язати цю задачу і вперше дослідити цікаві особливості спектрів електронів і дірок у цій наносистемі.

II. ТЕОРІЯ СПЕКТРА ЕЛЕКТРОНА (ДІРКИ) В ЦИЛІНДРИЧНОМУ НАПІВПРОВІДНИКОВОМУ КВАНТОВОМУ ДРОТІ, ЩО ПЕРЕТИНАЄ КВАНТОВУ ЯМУ

Розглянуто вміщену в середовище (3) наногетеросистему, яка складається з циліндричного напівпровідникового квантового дроту радіуса ρ_0 (1), що перпендикулярно перетинає безмежну плоску квантову яму шириною h_0 (2), утворюючи циліндричну КТ (0) (рис. 1).

Для того, щоб отримати спектр екситонів у досліджуваній системі, спершу необхідно розвинути теорію електронних та діркових спектрів і відповідних хвильових функцій, а оскільки вона цілком еквівалентна для обох квазічастинок, то в цьому параграфі ми опустимо індекси електрона чи дірки й будемо розглядати спектр і хвильові функції квазічастинки з відомою ефективною масою $m(\mathbf{r})$ і потенціялом $U(\mathbf{r})$.

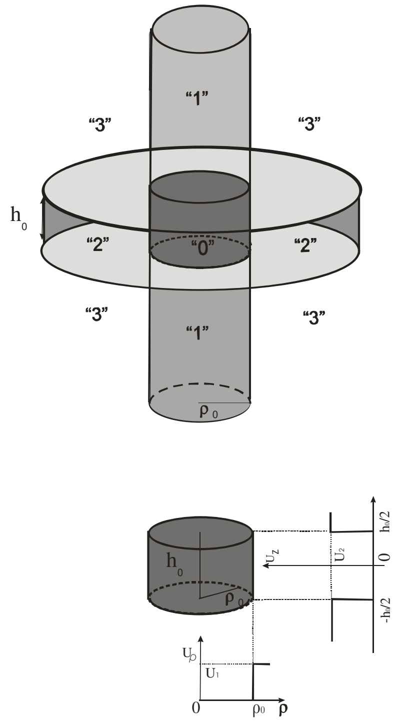

Рис. 1. Геометрична схема квантового дроту (1), що перетинає плоску квантову яму (2) у зовнішньому середовищі (3), та потенціяльна енерґія електрона в утвореній циліндричній КТ (0).

Ефективні маси й потенціяльні енерґії електрона в різних ділянках наногетеросистеми вважаються, як це прийнято в літературі [3,10–12,14], відомими й рівними тим, якими квазічастинка характеризується в масивних аналогах складових нанокристалів

$$m(\mathbf{r}) = \begin{cases} m_0, & \text{середовище “0”}, \\ m_1, & \text{середовище “1”}, \\ m_2, & \text{середовище “2”}, \end{cases} \tag{1}$$

$$U(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, & \text{середовище “0”}, \\ U_1, & \text{середовище “1”}, \\ U_2, & \text{середовище “2”}, \\ \infty, & \text{середовище “3”}. \end{cases} \tag{2}$$

Енерґетичний спектр і хвильові функції квазічастинки визначають, як відомо [15,16], рівнянням Шредингера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2}\nabla\frac{1}{m(\mathbf{r})}\nabla + U(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \tag{3}$$

яке в доцільній для цього випадку циліндричній системі координат є таким

$$\Big[-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{1}{m(\rho,z)}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$
$$+U(\rho,z)\Big]\psi(\rho,\varphi,z) = E\psi(\rho,\varphi,z). \tag{4}$$

Ураховуючи симетрію задачі, розв'язок рівняння (4) зручно шукати в різних ділянках простору в такому вигляді:

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \psi_0(\rho,\varphi,z) = A_0 J_m(\chi_0\rho)\exp(im\varphi)\begin{pmatrix}\sin k_0 z\\ \cos k_0 z\end{pmatrix}, & (\text{“0”}) \\ \psi_1(\rho,\varphi,z) = A_1 J_m(\chi_1\rho)\exp(im\varphi)\exp(-k_1 z), & (\text{“1”}) \\ \psi_2(\rho,\varphi,z) = A_2, K_m(\chi_2\rho)\exp(im\varphi)\begin{pmatrix}\sin k_2 z\\ \cos k_2 z\end{pmatrix}, & (\text{“2”}) \end{cases} \tag{5}$$

де A_0, A_1, A_2 — деякі константи, $J_m(\rho)$ і $K_m(\rho)$ функція Бесселя й Макдональда цілого порядку, m — магнетне квантове число,

$$\chi_0 = \sqrt{\tfrac{2m_0}{\hbar^2}\left(E - \tfrac{\hbar^2 k_0^2}{2m_0}\right)}, \qquad \chi_1 = \sqrt{\tfrac{2m_1}{\hbar^2}\left(U_1 - E + \tfrac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1}\right)},$$
$$\chi_2 = \sqrt{\tfrac{2m_2}{\hbar^2}\left(U_1 - E + \tfrac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2}\right)}. \tag{6}$$

k_0, k_1, k_2 — поки що невідомі величини.

Розв'язки задачі повинні задовольняти граничні умови неперервности хвильових функцій та потоків їхньої густини ймовірности на всіх межах поділу між внутрішніми середовищами наногетеросистеми (“0” – “1” та “0” – “2”) (рис. 1).

$$\left\{\begin{array}{l} \psi_0(\rho,\varphi,z)\Big|_{\rho=\rho_0}=\psi_2(\rho,\varphi,z)\Big|_{\rho=\rho_0}, \\ \frac{1}{m_0}\frac{\partial\psi_0(\rho,\varphi,z)}{\partial\rho}\Big|_{\rho=\rho_0}=\frac{1}{m_2}\frac{\partial\psi_2(\rho,\varphi,z)}{\partial\rho}\Big|_{\rho=\rho_0}, \end{array}\right\} (\text{“0”–“2”}) \\ \begin{array}{l} \psi_0(\rho,\varphi,z)\Big|_{z=h_0/2}=\psi_1(\rho,\varphi,z)\Big|_{z=h_0/2}, \\ \frac{1}{m_0}\frac{\partial\psi_0(\rho,\varphi,z)}{\partial z}\Big|_{z=h_0/2}=\frac{1}{m_1}\frac{\partial\psi_1(\rho,\varphi,z)}{\partial z}\Big|_{z=h_0/2}, \end{array}\Bigg\} (\text{“0”–“1”}) \tag{7}$$

Крім цього, на межах наносистеми із зовнішнім середовищем, через наявність безмежного потенціяльного бар'єра, повинні зникати хвильові функції ψ_1 і ψ_2

$$\psi_1(\rho,\varphi,z)\Big|_{\rho=\rho_0}=0, \quad (\text{“1”–“3”}),$$

$$\psi_2(\rho,\varphi,z)\Big|_{z=h_0/2}=0, \quad (\text{“2”–“3”}). \tag{8}$$

Із цих умов визначаємо величини

$$\chi_1=\frac{x_{p_д m}}{\rho_0}, \qquad k_2=\frac{\pi p_я}{h_0}. \tag{9}$$

Тут $x_{p_д m}$ — нулі функції Бесселя цілого порядку, де число $p_д=1,2,3,\ldots$ — номер нуля, що зумовлений обмеженням руху квазічастки з квантового дроту в навколишнє середовище в радіяльному напрямку, число $p_я=1,2,3,\ldots$ — зумовлює обмеження руху квазічастинки з квантової ями в навколишнє середовище в напрямку, паралельному до аксіяльної осі.

З умови нетривіяльности розв'язку системи рівнянь (7) щодо коефіцієнтів A_0, A_1, A_2 при врахуванні умови нормування

$$\iiint|\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}=1 \tag{10}$$

отримуємо систему трансцендентних рівнянь, яка однозначно визначає хвильові функції $\psi^{e(p_д,p_я)}_{n_z,n_\rho,m}$ та енерґетичний спектр електрона ($E^{e(p_д,p_я)}_{n_z,n_\rho,m}$) при фіксованих значеннях чисел $p_д,p_я$ та квантових чисел n_z,n_ρ,m.

$$\begin{cases} \frac{k_0}{m_0}\left(\mathrm{ctg}\left(k_0\frac{h_0}{2}\right)-\mathrm{tg}\left(k_0\frac{h_0}{2}\right)\right)=-\frac{k_1}{m_1}, \\ \frac{\chi_0}{m_0}\frac{J'_m(\chi_0\rho_0)}{J_m(\chi_0\rho_0)}=\frac{\chi_2}{m_2}\frac{K'_m(\chi_2\rho_0)}{K_m(\chi_2\rho_0)} \end{cases} \tag{11}$$

Зауважимо, що числа $p_д,p_я$ формально подібні до квантових чисел n_z,n_ρ, тільки перші визначаються лише умовами зникнення хвильових фукцій на відповідних межах із зовнішним середовищем, а другі — умовами неперервности хвильових функцій і потоків густин на внутрішніх межах складної наногетеросистеми. Отже, "фізична природа" груп чисел $(p_д,p_я)$ і (n_z,n_ρ) трохи подібна, а трохи відрізняється, тому надалі ми будемо називати $(p_д,p_я)$ просто числами, а (n_z,n_ρ) — квантовими числами.

III. АНАЛІЗ ТА ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ

Числові розрахунки енерґетичного спектра електронів (дірок) виконано для наногетеросистеми з напівпровідників β-HgS (середовище "0") і β-CdS (середовища "1" і "2"). Матеріяльні параметри таких напівпровідників добре відомі [14].

Результати розрахунків залежностей енерґій електрона ($E^{e(p_д,p_я)}_{n_z,n_\rho,m}$) і дірки ($E^{h(p_д,p_я)}_{n_z,n_\rho,m}$) від радіуса квантового дроту (ρ_0) при фіксованій висоті циліндричної КТ $h_0=10\,a_{\mathrm{HgS}}$ і фіксованих числах $p_д,p_я$ та при квантовому числі $m=0$ зображено на рис. 2a,b, при тих же числах ($p_д,p_я$, $m=0$) залежність ($E^{e(p_д,p_я)}_{n_z,n_\rho,m}$) і ($E^{h(p_д,p_я)}_{n_z,n_\rho,m}$) від висоти циліндричної КТ (h_0) при $\rho_0=10\,a_{\mathrm{HgS}}$ зображено на рис. 2c,d.

Із фізичних міркувань зрозуміло, і це видно з рис. 2, що якісно поведінка спектрів електрона й дірки однакова, а кількісна різниця зумовлена лише відмінністю їхніх ефективних мас і потенціяльних енерґій. Тому досить обмежитись аналізом спектра електронних станів.

З рисунка 2a,b видно, що зі збільшенням ρ_0 всі енерґетичні рівні $E^{e(1,1)}_{n_z,n_\rho,0}$ зміщуються в ділянку менших енерґій. За фіксованих $p_д=1$, $p_я=1$, $m=0$ спектральні рівні утворюють групи за квантовим числом n_z, у які входять рівні з різним значенням квантового числа n_ρ. Таким чином, основному енерґетичному рівню відповідає стан із числами $p_д=1$, $p_я=1$ та з квантовими числами $m=0$, $n_z=1$, $n_\rho=1$. Енерґії групи рівнів із $n_z=1$ і $n_z=2$ зі збільшенням радіуса квантового дроту ρ_0 зменшуються і, як і повинно бути в граничному випадку ($\rho_0\gg h_0$), наближаються до значень енерґій, що відповідають двом енерґетичним станам електрона $E^e_{n_z=1,2,m=0}$ у плоскій КЯ безмежного радіуса ($\rho_0\to\infty$) наносистеми β-HgS, розташованій у середовищі β-CdS.

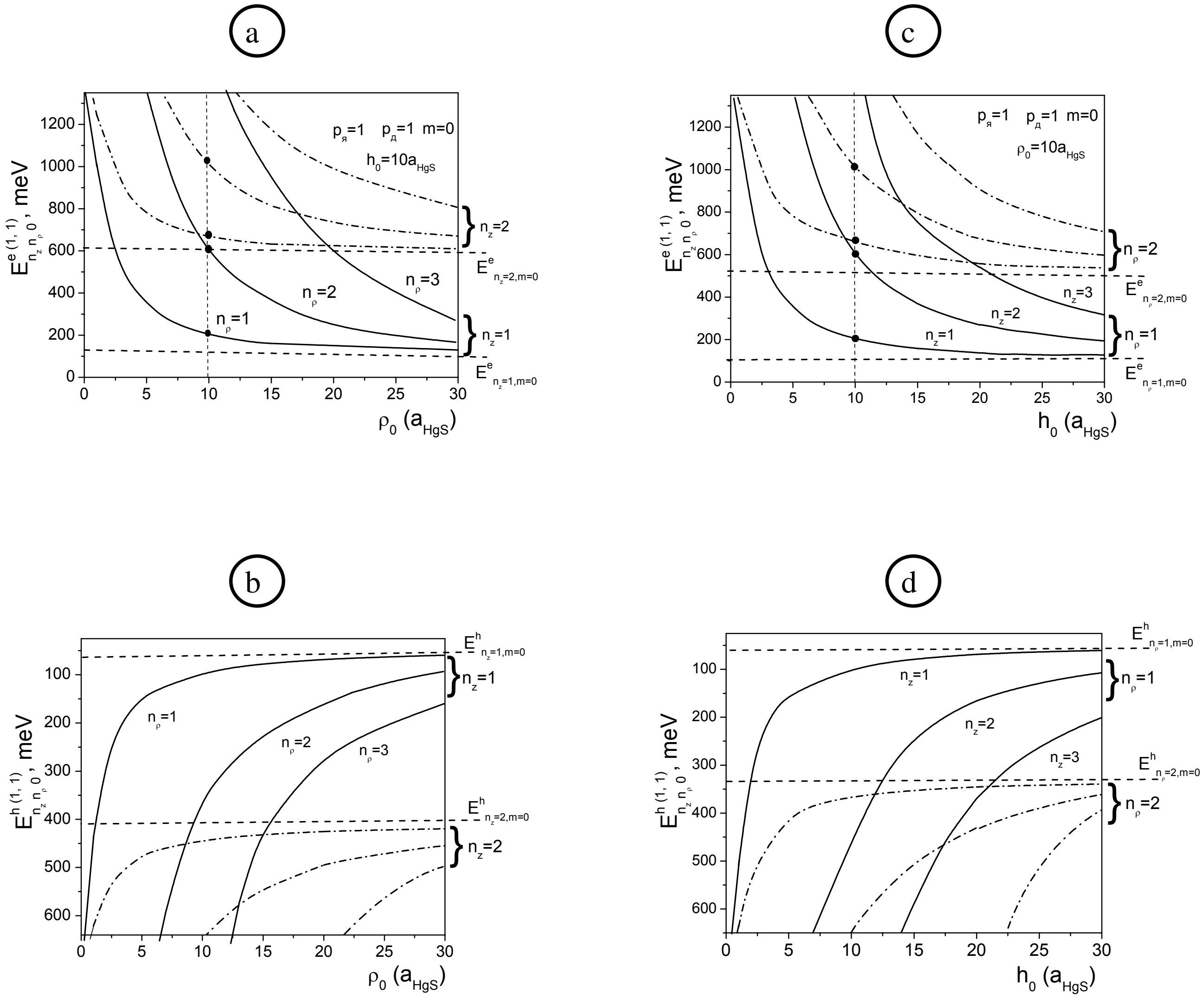

Рис. 2. Залежність енерґетичних рівнів $E^{e,h(1,1)}_{n_z,n_\rho,m}$ електрона та дірки від радіуса циліндричного КД (ρ_0) при $h_0 = 10a_{\mathrm{HgS}}$ (a,b) і від висоти h_0 циліндричної КТ при $\rho_0 = 10a_{\mathrm{HgS}}$ (c,d).

З рисунка (2c,d.) видно, що поведінка енерґетичних рівнів електрона й дірки за збільшенням висоти циліндричної КТ подібна до тієї, що була при збільшенні радіуса квантового дроту, але змінюється ієрархія енерґетичних рівнів. Так, тепер вони утворюють групи за квантовим числом n_ρ, у які входять стани з різними квантовими числами n_z. Як і раніше, основному енерґетичному рівню відповідають числа $p_{\text{д}} = 1$, $p_{\text{я}} = 1$ та квантові числа $m = 0$, $n_z = 1$, $n_\rho = 1$. Зі збільшенням висоти ЦКТ групи рівнів із $n_\rho = 1$ і $n_\rho = 2$ асимптотично наближаються до значень енерґії $E^{e,h}_{n_\rho=1,2,m=0}$, що відповідає двом квантовим станам квазічастинки у квантовому дроті β-HgS радіуса $\rho_0 = 10a_{\mathrm{HgS}}$, який розташований у середовищі β-CdS.

На рис. 3a,b,c,d зображено залежності густин ймовірностей $W^{e(1,1)}_{n_z,n_\rho,m} = \rho\left|\psi^{e(1,1)}_{n_z,n_\rho,m}(\rho,z)\right|^2$ основного й кількох нижніх збуджених станів електрона від змінних z і ρ. З рис. 3a видно, що $W^{e(1,1)}_{110}$ має один максимум, як і повинно бути із загальної теорії локалізованих станів квазічастинок. Рис. 3b відповідає першому збудженому енерґетичному рівню з числами $p_{\text{я}} = 1$, $p_{\text{д}} = 1$ та квантовими числами $m = 0$, $n_z = 1$, $n_\rho = 2$. З рисунка видно, що густина ймовірности має два максимуми вздовж напрямку ρ і один — уздовж напрямку z. Рис. 3c описує густину ймовірности перебування електрона на третьому збудженому рівні з числами $p_{\text{я}} = 1$, $p_{\text{д}} = 1$ та квантовими числами $n_z = 2$, $n_\rho = 1$, $m = 0$. Відповідно $W^{e(1,1)}_{021}$ має два максимуми вздовж напрямку z (хвильова функція симетрична щодо заміни z на $-z$) і один — уздовж напрямку ρ. Нарешті рис. 3d відповідає числам $p_{\text{я}} = 1$, $p_{\text{д}} = 1$ та квантовим числам $n_z = 2$, $n_\rho = 2$, $m = 0$ і густина ймовірности має по два максимуми вздовж обох напрямків.

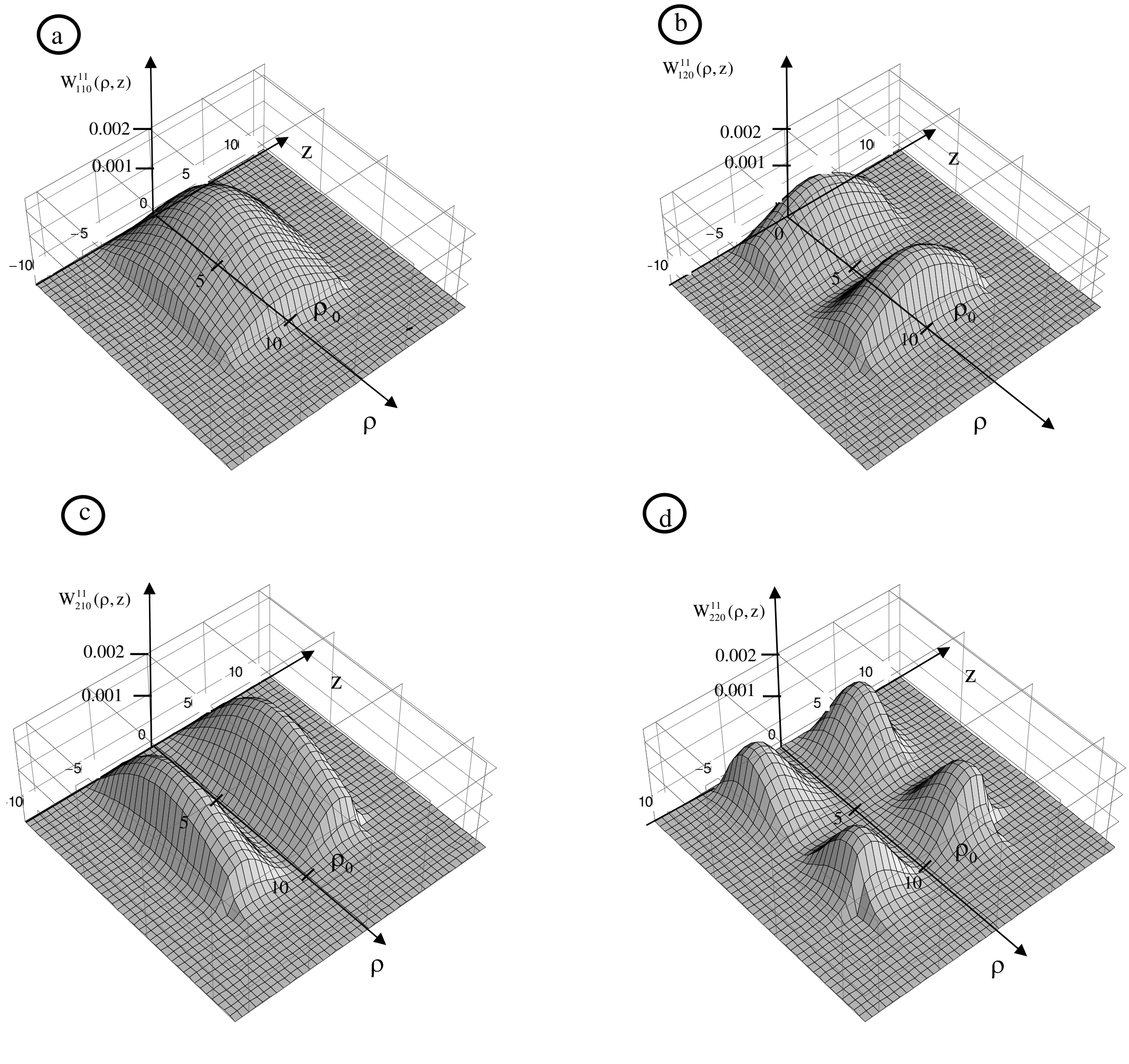

Рис. 3. Залежності густин ймовірностей знаходження електрона в кількох станах від змінних ρ і z при $\rho_0 = 10a_{\mathrm{HgS}}$ і $h_0 = 10a_{\mathrm{HgS}}$.

Із загального аналізу системи рівнянь (11) випливає, що всі електронні (діркові) стани є двічі виродженими за магнетним квантовим числом m (крім $m = 0$). Окрім того, як видно з рис. 2, існує також випадкове виродження різних станів (навіть при $m = 0$), оскільки при зміні радіуса квантового дроту ρ_0 чи висоти квантової точки h_0 перетинаються між собою рівні з різними значеннями n_z та n_ρ (рис. 2).

На рис. 4a,b,c наведено результати розрахунку енерґій електронного спектра для чотирьох найнижчих енерґетичних рівнів із $n_z = 1, 2$, $n_\rho = 1, 2$ при $m = 0, 1, 2$, $\rho_0 = 10a_{\mathrm{HgS}}$, $h_0 = 10a_{\mathrm{HgS}}$ в інтервалах значень чисел $p_{\text{д}}$ і $p_{\text{я}}$ від 1 до 5. З рисунка добре видно основні властивості $E^{e(p_{\text{д}}, p_{\text{я}})}_{n_z n_\rho m}$. Вони такі.

Зі збільшенням величини квантових чисел n_z, n_ρ, m енергії електронів у стаціонарних станах зростають. При цьому залежність енерґій квазічастники від чисел $p_{\text{д}}$ і $p_{\text{я}}$ плавна (майже лінійна), а від магнетного квантового числа m — різкіша. Так, наприклад, якщо при $m = 0$ у наногетеросистемі існують стаціонарні стани із $n_z = 1, 2$, $n_\rho = 1, 2$ (рис. 4a), то при $m = 1$ стан із $n_z = 2$, $n_\rho = 2$ існує лише при $p_{\text{я}} = 1$, а $p_{\text{д}} = 1, 2, 3$ (рис. 4b). Якщо ж $m = 2$, то стаціонарних станів із $n_\rho = 2$ не існує взагалі (вони потрапляють у неперервний спектр енерґій).

Підсумовуючи отримані результати, варто відзначити, що розвинена в роботі теорія не лише описує властивості спектрів електронів та дірок, але й на базі знайдених хвильових функцій цих квазічасток дає змогу побудувати теорію екситонного спектра, а також досліджувати взаємодію цих квазічасток із фононами, що буде зроблено в наступних роботах.

Нарешті, слід зауважити, що отримані позитивні результати використаного в роботі математичного методу дає надію для дослідження ще складніших просторових комбінацій наносистем, створених експериментально.

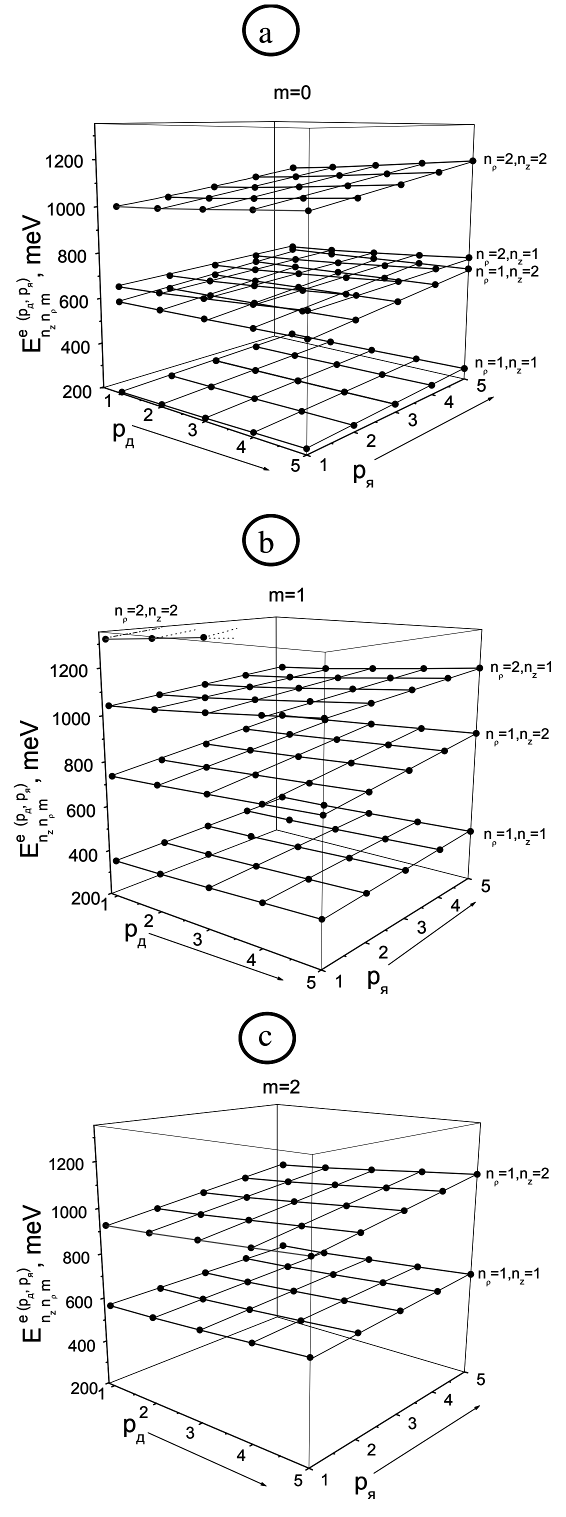

Рис. 4. Залежність енергії електрона $E^{e,h(p_{\text{д}},p_{\text{я}})}_{n_z,n_\rho,m}$ від квантових чисел n_z, n_ρ, m в інтервалах значень $p_{\text{д}}$ і $p_{\text{я}}$ від 1 до 5 при $\rho_0 = 10a_{\text{HgS}}$, $h_0 = 10a_{\text{HgS}}$.

[1] Ж. И. Алферов, Физ. техн. полупр. **32**, 3 (1998).
[2] Н. Н. Леденцов, В. М. Устинов, В. А. Щукин, П. С. Копьев, Ж. И. Алферов, Д. Бимберг, Физ. техн. полупр. **32**, 385 (1998).
[3] Н. В. Ткач, Физ. техн. полупр. **39**, 1109 (1997).
[4] Ch. Greus, R. Spiegel, P. A. Knipp, T. L. Reinecke,

F. Faller, A. Forchel, Phys. Rev. B **49**, 5753 (1994).
[5] D. Schooss, A. Mews, A. Eychmuller, H. Weller, Phys. Rev. B **49**, 17072 (1994).
[6] X. F. Wang, X. L. Lei, Phys. Rev. B **49**, 4780 (1994).
[7] N. C. Constantinou, B. K. Ridley, Phys. Rev. B **41**, 10627 (1990).
[8] N .Mori, T. Ando, Phys. Rev. B **40**, 6175 (1989).
[9] G. Q. Hai, F. M. Peeters, J. T. Devreese, Phys. Rev. B **48**, 4666 (1993).
[10] M. Tkach, V. Holovatsky, O. Voitsekhivska, Physica E **11**, 17 (2001).
[11] Н. В. Ткач, А. М. Маханец, Физ. тверд. тела **47**, 550 (2005).
[12] М. В. Ткач, О. М. Маханець, А. М. Грищук, Укр. фіз. журн. **50**, 1288 (2005).
[13] R. W. Siegel, in *Proc. E-MRS Fall Meeting* (2004), p. 24.
[14] М. В. Ткач, Я. М. Березовський, Укр. фіз. журн. **48**, 75 (2003).
[15] Kai C. Yung, H. Yee Jick, Phys. Rev. A **50**, 104 (1994).
[16] A. V. Kolesnikov, A. P. Silin, Phys. Rev. B **59**, 7596 (1999).

THE PROPERTIES OF ELECTRON AND HOLE SPECTRA IN A QUANTUM WIRE CROSSING PLANE QUANTUM WELL IN EXTERNAL MEDIUM

M. V. Tkach, O. M. Makhanets, A. M. Gryschyk
Fedkovych Chernivtsi National University,
2 Kotsiubynsky St., Chernivtsi, UA–58012, Ukraine
E-mail: theorphys@chnu.cv.ua

The electron and hole 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. The dependences of quasiparticles energies on the radius of quantum wire and width of the quantum well are studied in detail.