УДК 534.266

ТКАЧ М.В, ПРОНИШИН І.В., МАХАНЕЦЬ О.М.

# ПРИЄДНАНІ ПЛОСКІ ХВИЛІ В НАДГРАТЦІ ЦИЛІНДРИЧНИХ КВАНТОВИХ ДРОТІВ

Методом приєднаних плоских хвиль виконано теоретичний розрахунок електронного і діркового спектрів в надгратці циліндричних квантових дротів, утвореній квантовими дротами $\beta - HgS$, вміщеними в кристал $\beta - CdS$.

Нові незвичайні явища фундаментального характеру і можливості практичного застосування наногетеросистем приваблюють до них підвищений інтерес дослідників. Можливості подальших шляхів розвитку цієї області недавно детально проаналізовані Ж.Алфьоровим в роботі [1]. Серед інших технологічно створених перспективних систем відзначались і надгратки квантових ям (КЯ), так як шляхом зміни їх просторових характеристик можна керувати фундаментальними властивостями цих систем (положеннями енергетичних зон, ефективними масами квазічасток і т.д.).

Цікавим об'єктом дослідження є гетеросистема, яка складається з циліндричних квантових дротів (КД) одного напівпровідникового матеріалу, які періодично розташовані в другому матеріалі і утворюють надгратку в напрямку, перпендикулярному до аксіальної осі КД. Якщо довжина КД значно перевищує довжину вільного пробігу квазічастки, то КД можна вважати нескінченно довгим, а радіус КД і відстань між найближчими сусідами буде характеризуватись нанорозмірами. Зрозуміло, що просторова зміна розмірів і розташувань КД повинна приводити до зміни електронних, діркових і екситонних зон в такій надгратці.

Мета роботи - виконати теоретичний розрахунок електронного і діркового спектрів, а також визначити хвильові функції цих квазічасток в надгратці циліндричних квантових дротів (НЦКД).

Вивчається система, яка складається із циліндричних КД (напівпровідниковий матеріал 1), періодично розташованих в середовищі (напівпровідниковий матеріал 2). Далі, для конкретності, будемо розглядати електрон, для якого в циліндричній системі координат з віссю $OZ$ вздовж аксіальної осі одного із КД потенціальна енергія і ефективна маса є радіально симетричними функціями

$$U(\vec{\rho}) = \begin{cases} U_0 & \text{в КП}, \\ 0 & \text{ззовні КП}, \end{cases} \tag{1}$$

$$\mu(\vec{\rho}) = \begin{cases} \mu_1 & \text{в КП}, \\ \mu_2 & \text{ззовні КП}. \end{cases} \tag{2}$$

В зв'язку з залежністю $\mu(\rho)$ змінні $\rho$ і $z$ в рівнянні Шредінгера не розділяються, тому для його розв'язку застосовується теорія збурень. Енергія і хвильова функція електрона в нульовому наближенні визначаються співвідношеннями

$$E^0 = E_\perp^0 + E^0(k_{||}) = E_\perp^0 + \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2\mu_{||}^0}, \tag{3}$$

$$\psi^0(\rho,\varphi,z) = \frac{1}{\sqrt{L}}\psi^0(\vec{\rho})e^{ik_{||}z}, \tag{4}$$

де $L$ – довжина основної області вздовж осі КД, $\mu_{||}^0 = \dfrac{\mu_1+\mu_2}{2}$.

Величини $E_\perp^0$ і $\psi^0(\vec{\rho})$ задовольняють рівнянню Шредінгера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{1}{\mu(\rho)}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)+U(\rho)\right]\psi^0(\vec{\rho}) = E_\perp^0\psi^0(\vec{\rho}). \tag{5}$$

Це рівняння можна розв'язати методом приєднаних плоских хвиль (ППХ), який добре відомий для трьохмірних систем.

Модифікація методу ППХ на випадок досліджуваної нами плоскої системи виконується таким чином.

Виберемо початок координат плоскої системи в центрі кола радіуса $\rho_0$, сумістивши його з вузлом гратки Вігнера-Зейтца. Так званий "m-t потенціал" теорії ППХ в нашому випадку має простий вигляд

$$U(\rho) = \begin{cases} -U_0 & \text{якщо } \rho \le \rho_0, \\ 0 & \text{якщо } \rho > \rho_0. \end{cases} \tag{6}$$

Згідно методу ППХ, далі точно розв'язуємо рівняння Шредінгера для області плоского простору всередині квантових ям, де хвильова функція представляється у вигляді суперпозиції циліндричних гармонік. Оскільки в просторі ззовні ям потенціал дорівнює нулю, то там хвильова функція повинна мати вигляд плоскої хвилі, яка може бути розкладена по циліндричних гармоніках Коефіцієнти розкладу знаходяться з умови неперервності функцій на границі кола радіуса $\rho_0$. В результаті отримана хвильова функція електрона, яка називається приєднаною плоскою хвилею (ППХ).

ППХ задовольняє умові періодичності Блоха, але ще не задовольняє рівнянню Шредінгера з потенціалом всієї надгратки, оскільки до цих пір не встановлений зв'язок між енергією і хвильовим вектором. Щоб знайти цей зв'язок, згідно теореми Блоха будемо шукати хвильову функцію квазічастки у вигляді лінійної комбінації ППХ

$$\psi_{\vec{k}_\perp}(\vec{\rho}) = \sum_{\vec{g}} c_{\vec{k}_\perp - \vec{g}} \Phi_{\vec{k}_\perp - \vec{g}}(\vec{\rho}), \tag{7}$$

де сумування ведеться по векторах оберненої гратки $\vec{g}$, а коефіцієнти $c_{\vec{k}_\perp - \vec{g}}$ підлягають визначенню.

Оскільки кожна ППХ має розрив похідної на границі між КЯ і міжямними областями, згідно методу ППХ, краще використовувати не рівняння Шредінгера, а еквівалентний йому варіаційний принцип. Визначивши функціонал енергії на хвильових функціях (7) і мінімізувавши його по величинах $c_{\vec{k}_\perp - \vec{g}}$, отримаємо систему рівнянь відносно коефіцієнтів розкладу, умова сумісності якої дає секулярне рівняння для знаходження власних значень $E_\perp^0$ як функцій хвильового вектора $\vec{k}_\perp$

$$\det\left\| \left[ \frac{\hbar^2}{2\mu_2}(\vec{k}_\perp - \vec{g})^2 - E_\perp^0 \right]\delta_{\vec{g}\vec{g}'} + \Gamma_{\vec{g}\vec{g}'} \right\| = 0\,, \qquad (8)$$

де величини $\Gamma_{\vec{g}\vec{g}'}$ - фур'є-компоненти ефективного потенціалу надгратки квантових ям.

Враховуючи збурення задачі і хвильові функції (7), отримаємо поздовжню ефективну масу квазічастки в першому наближенні

$$\mu_{\|n}^{(1)} = \frac{\mu_\|^0}{1 + I\mu_\|^0}\,, \qquad (9)$$

де величина $I$ містить інтегрування по $\vec{\rho}$ оператора збурення на хвильових функціях (7).

Відмітимо, що в нульовому наближенні поздовжня ефективна маса квазічастки не залежить від станів її поперечного руху, а в першому наближенні вона істотно залежить від цих станів. У випадку необхідності енергетичний спектр і хвильові функції далі можна уточнювати згідно теорії збурень.

Застосуємо розвинуту теорію для розрахунку спектра електрона і дірки в квадратній надгратці, утвореній КД $\beta - HgS$, вміщеними в кристал $\beta - CdS$. Вибір системи обумовлений тим, що обидва кристали мають дуже близькі розміри елементарних комірок і границя між ними достатньо чітка, як у випадку експериментально реалізованих складних квантових ям [1].

На рисунку 1 приведений спектр електрона і дірки для НЦКД. Матеріальні параметри вказаних кристалів відомі в літературі.

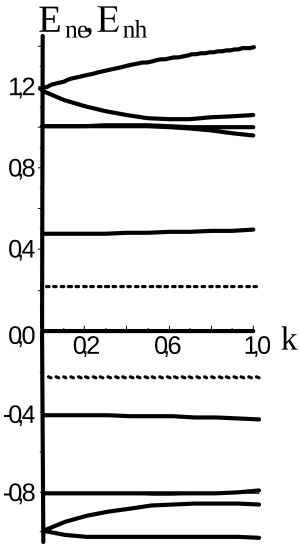


Рис.1 Спектр електрона і дірки для НЦКД.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ


1. Ж.И. Алфёров, История и будущее полупроводниковых гетероструктур.// ФТП.-1998.-т.32,в.1.-с.3-11.


SUMMARY


TKACH M.V., PRONYSHYN I.V., MAKHANETS O.M.


**AUGMENTED PLANE WAVES IN SUPERLATTICE OF CYLINDRICAL QUANTUM WIRES**


The theoretical calculations of the electron and hole spectrum in superlattice of cylindrical quantum wires is performed. Superlattice formed by $\beta - HgS$ quantum wires, included in $\beta - CdS$ crystal. The augmented plane waves method is used.