УДК 534.266

© 1998 р. М.В. Ткач, $\boxed{\text{І.В. Пронишин}}$, О.М. Маханець

Чернівецький державний університет ім.Ю.Федьковича, Чернівці

# ЕЛЕКТРОН У КВАЗІПЛОСКІЙ НАДГРАТЦІ ЦИЛІНДРИЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧОК

Побудовано теорію спектра електрона в напівпровідниковій квазіплоскій надгратці циліндричних квантових ям. Показано, що утворенню зон НЦКЯ сприяє мале відношення радіуса до висоти циліндричної квантової ями, а при малих висотах утворення таких зон неможливе.

The theory of electron spectrum in semiconductor quasiplane superlattice of cylindric quantum wells is build. It is shown that small relationship between radius and cylindric quantum well height causes the creation of SCQW bands.

Лише кілька років тому експериментально отримані [1] надгратки квантових точок. Теорія спектрів квазічасток у таких системах поки що відсутня. А оскільки на подібні об'єкти покладається велика надія не лише дослідників фундаментальних аспектів фізики, але й прикладників, то актуальність робіт цього напрямку безсумнівна.

У запропонованій роботі вивчається електронний спектр напівпровідникової гетеросистеми, що являє собою тонку напівпровідникову плівку нанорозмірної товщини ($h$), в якій розташовані нанокристали циліндричної форми (радіуса $b$) так, що вони утворюють квазіплоску надгратку квантових ям (потенціальна енергія електрона в ямі менша, ніж у кристалі-матриці). Будемо вважати, що надгратка циліндричних квантових ям (НЦКЯ) розташована у вакуумі. Ефективна маса електрона в ямі $\mu_1$, а в матриці $\mu_2$. Потенціали ями і матриці відносно вакууму ($-V_1$) і ($-V_2$) відповідно. Всю систему НЦКЯ будемо вважати безмежно глибокою потенціальною ямою, оскільки вакуум з обох боків НЦКЯ є потужним потенціальним бар'єром.

Щоб отримати спектр електрона в системі, потрібно розв'язати стаціонарне рівняння Шредінгера з гамільтоніаном

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\left(\vec{\nabla}_{xy\varphi}\frac{1}{\mu(x,y)}\vec{\nabla}_{xy\varphi} + \frac{1}{\mu(x,y)}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + U(x,y,z)\right). \quad (1)$$

У системі декартових координат з віссю O$Z$ уздовж аксіальної осі одного з циліндрів і з площиною $OXY$, яка проходить через середину висоти циліндрів, потенціал $U(x,y,z)$ можна записати у вигляді

$$U(x,y,z) = U(x,y) + \begin{cases} 0 & z < h/2 \\ \infty & z \geq h/2 \end{cases}, \quad (2)$$

$$U(x,y) = \begin{cases} -V_1 & x,y \text{ в ямах} \\ -V_2 & x,y \text{ за ямами} \end{cases}. \quad (3)$$

Тепер гамільтоніан (1) зручно подати у вигляді

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \Delta\hat{H}, \quad (4)$$

де

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2}\left(\vec{\nabla}_{xy}\frac{1}{\mu(x,y)}\vec{\nabla}_{xy}\right) + U(x,y) - \frac{\hbar^2}{2\bar{\mu}}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \begin{cases} 0 & |z| < h/2 \\ \infty & |z| \geq h/2 \end{cases} \quad (5)$$

- основний гамільтоніан системи,

$$\Delta\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{\mu(\rho)} - \frac{1}{\bar{\mu}}\right)\frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (6)$$

- збурення. Величина $\bar{\mu}$ може бути визначена як

$$\bar{\mu} = \frac{\mu_1 + \mu_2}{2}. \quad (7)$$

Розв'язок рівняння Шредінгера в нульовому наближенні

$$(\hat{H}_0(x,y,z) - E^0)\psi^0(x,y,z) = 0 \quad (8)$$

доцільно шукати у вигляді

$$\psi^0(x,y,z) = \psi^0_{\perp}(x,y)\varphi(z), \quad (9)$$

де функція $\varphi(z)$ є власною функцією рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2\bar{\mu}}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\begin{Bmatrix}0 & |z|<h/2\\ \infty & |z|\geq h/2\end{Bmatrix}\varphi_n(z)=\varepsilon_n\varphi_n(z)\,, \quad (10)$$

тобто

$$\varepsilon_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\bar{\mu}h^2}n^2,$$

$$\varphi_n(z)=\begin{cases}\varphi_n^s=\sqrt{\dfrac{2}{h}}\cos\dfrac{\pi n}{h}z & n=1,3,...\\ \varphi_n^a=\sqrt{\dfrac{2}{h}}\sin\dfrac{\pi n}{h}z & n=2,4,...\end{cases} \quad (11)$$

Тепер рівняння (8) буде мати вигляд

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2}\left(\vec{\nabla}_{xy}\frac{1}{\mu(x,y)}\vec{\nabla}_{xy}\right)+ +U(x,y)-E_\perp^0\right\}\psi_\perp^0=0, \quad (12)$$

де
$$E_\perp^0=E^0-\frac{\pi^2\hbar^2}{2\bar{\mu}h^2}n^2. \quad (13)$$

Далі рівняння (12) розв’язується методом приєднаних плоских хвиль, який був розроблений раніше [2] для плоскої надгратки квантових ям. Згідно з цим методом записується рівняння Шредінгера для хвильової функції всередині плоскої КЯ, яке для радіальної функції $f_m(\rho)$ у полярній системі координат має вигляд

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu_1}\left[\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\left(\rho\frac{d}{d\rho}\right)-\frac{m^2}{\rho^2}\right]-U_0+ +\frac{\pi^2\hbar^2}{2\bar{\mu}h^2}n^2-E^0\right\}f_m(\rho)=0, \quad (14)$$

де $U_0=U_1-U_2$.

За умовою повинна виконуватись нерівність

$$\varepsilon=-E^0>0 \quad (15)$$

і тоді розв'язком (14) є функція Бесселя

$$f_m(\rho)=J_m(\alpha\rho)=J_m(\alpha at)\,, \quad (16)$$

де

$$\alpha a=\sqrt{2\mu_1\hbar^{-2}(U_0-\varepsilon)-\frac{\mu_1}{\bar{\mu}}\frac{a^2}{h^2}n^2}\,. \quad (17)$$

Оскільки підкореневий вираз повинен бути позитивним, то з (17) і (15) можна отримати об’єднану умову:

$$U_0-\frac{\hbar^2}{2\bar{\mu}}\frac{a^2}{h^2}n^2>\varepsilon>0\,. \quad (18)$$

З (18) випливає висновок: електронні зони, пов’язані з квазіплоскою надграткою квантових ям, можливі лише при умові

$$U_0>\frac{\hbar^2}{2\bar{\mu}}\frac{a^2}{h^2}n^2\,. \quad (19)$$

Отже, утворенню зон НЦКЯ сприяє мале відношення радіуса до висоти (*a*/*h*) циліндричних нанокристалів та велика глибина потенціальних ям. При малих значеннях висоти *h* утворення зон НЦКЯ неможливе.

## СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ


1. *Алфёров Ж.И.* История и будущее полупроводниковых гетероструктур // ФТП. - 1998. - **32**, №1. - P.3-7.
2. *Tkach M., Pronyshyn I., Makhanets O., Zharkoy V.* Exciton spectrum in the superlattice composed of cylindric quantum wires // 194th Electrochemical Society Meeting, November 1-6, 1998. - Boston, USA, 1998. - C.78.