УДК 534.266

© 2000 р. В.А. Головацький

Чернівецький національний університет ім. Ю.Федьковича, Чернівці

РОЗРАХУНОК ЕЛЕКТРОННОЇ ЗОННОЇ СТРУКТУРИ У НАДГРАТЦІ СФЕРИЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧОК

У наближенні ефективних мас методом приєднаних плоских хвиль виконано розрахунок електронної зонної структури у надгратці сферичних квантових точок. Досліджено залежність найнижчої зони енергій від розмірів квантової точки та відстані між найближчими сусідами. Встановлено, що зі збільшенням розмірів квантової точки дно найнижчої зони енергій зсувається в область нижчих енергій, із збільшенням відстані між ними ширина енергетичних зон зменшується.

In effective mass approximation by the joined plane waves method calculation of electron band structure in the supperlatice of the spherical quantum dots was performed. It was investigated the dependence of the lowest band structure on the dimension of the quantum dot and on the distance between the nearest neighbours. It is established, that with increase of the quantum dot's dimensions the bottom of the lowest energy band shift into the region of lower energies and with increase of the distance between them, the width of energy bands decreases.

Напівпровідникові лазери на основі короткоперіодних плоских надграток, які інтенсивно почали вивчатись наприкінці 80-х років наглядно продемонстрували важливі наслідки просторового квантування електронів. Це насамперед більш короткі довжини хвиль випромінювання, менші значення порогового струму і слабша його температурна залежність [1].

Прогрес у фізиці двовимірних гетероструктур з квантовими ямами та їх прикладне застосування залучив багатьох вчених до вивчення систем, що володіють меншою розмірністю – квантових дротів та квантових точок (КТ). Лазери на КТ, як очікується, будуть мати більш високі характеристики у порівнянні з стандартними лазерами на квантових ямах. В них повинні проявитись такі риси, як наднизьке значення порогової густини струму та її висока температурна стабільність. Основна мета досліджень у цій області – виготовлення ідеальної напівпровідникової квантової точки, яка подібно до ізольованого атома мала би енергетичний спектр, що описується δ-функцією. Для найбільш повної реалізації переваг дискретного спектра КТ необхідно створити однорідний масив квантових точок, бо розмиття спектра через неоднорідність форм та розмірів КТ зведе нанівець всі переваги пониженої розмірності. Велика густина квантових точок також може привести до великої ширини енергетичних зон, що збільшить температурну залежність характеристик лазерного випромінювання.

Мета даної роботи – розрахунок електронної зонної структури впорядкованого масиву сферичних КТ на прикладі тривимірної надгратки сферичних нанокристалів HgS, розміщених у середовищі CdS (рис.1). Радіус КТ – R, а відстань між ними – L.

Впорядкований масив сферичних квантових точок у рамках наближення ефективної маси описується східцеподібним m-t-потенціалом.

За початок координат виберемо центр квантової точки, тоді потенціал у межах сфери Вігнера-Зейтца набуде вигляду

$$U(\vec{r})=\begin{cases}-U_0, & r\le R,\\ 0, & r>R.\end{cases} \qquad (1)$$

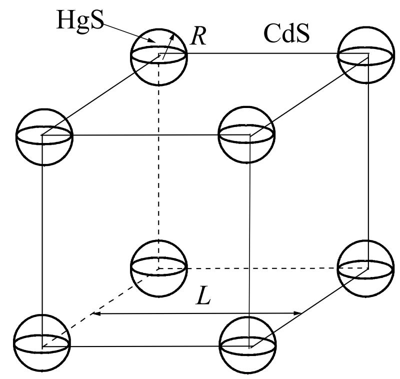

Рис.1. Схематична модель надгратки сферичних квантових точок HgS у матриці CdS.

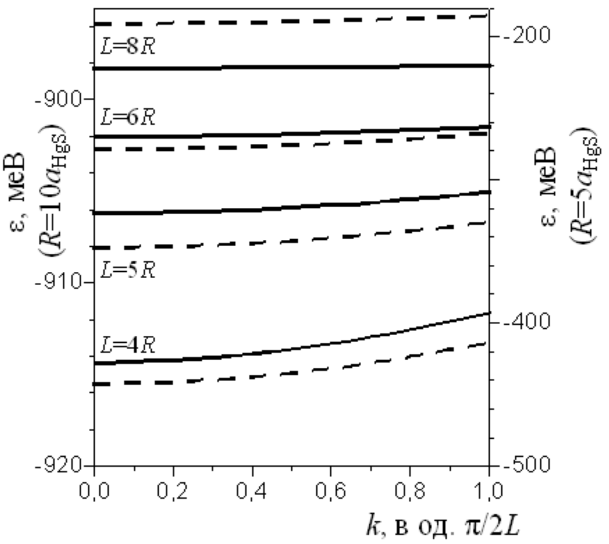

Рис.2. Еволюція найнижчої електронної мінізони із зміною періоду надгратки L. Суцільна лінія – R=10a_{HgS}, штрих-пунктирна – R=5a_{HgS}.

Рівняння Шредінгера для електрона, що знаходиться в області сферичного нанокристала матиме вигляд

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2}\vec{\nabla}\frac{1}{m(r)}\vec{\nabla}+U(r)\right)\Psi(\vec{r})=E\Psi(\vec{r}), \quad (2)$$

де

$$m(\vec{r})=\begin{cases} m_0\,, & r\le R,\\ m_1\,, & r>R.\end{cases} \quad (3)$$

Розв'язками цього рівняння є функції

$$\Psi(r,\theta,\varphi)=A_{\ell m}R_\ell(\varepsilon,r)Y_{\ell m}(\theta,\varphi)\,, \quad (4)$$

де $R_\ell(\varepsilon,r)=\begin{cases} j_\ell(\alpha r), & r\le R,\\ I_\ell(\beta r), & r>R,\end{cases}$ $\alpha=\dfrac{\sqrt{2m_1(U_0-|\varepsilon|)}}{\hbar}$,

$\beta=\dfrac{\sqrt{2m_1|\varepsilon|}}{\hbar}$.

Згідно з методом приєднаних плоских хвиль [2], хвильова функція, що задовольняє умови періодичності Блоха та умови неперервності повинні бути лінійною комбінацією приєднаних плоских хвиль, які містять функції (4) та плоскі хвилі, розкладені за сферичними функціями

$$\Phi_g(\vec{r})=\begin{cases}\Phi_g^{(0)}(\vec{r}), & r\le r_0,\\ \Phi_g^{(1)}(\vec{r}), & r>r_0,\end{cases} \quad (5)$$

де $\Phi_g^{(0)}(r)=\dfrac{4\pi}{\sqrt{L^3}}\sum\limits_{\ell,m} i^\ell\,\dfrac{j_\ell(|\vec{k}+\vec{g}|r_0)}{R_\ell(\varepsilon,r_0)}R_\ell(\varepsilon,r)\times$

$$\times \mathrm{Y}_{\ell m}(\theta,\varphi)\mathrm{Y}^*_{\ell m}(\theta_g,\varphi_g)\,,$$

$\Phi_g^{(1)}(r)=\dfrac{1}{\sqrt{L^3}}\exp\left[i(\vec{k}+\vec{g},\vec{r})\right]$, r_0 – радіус зшивки, який задовольняє умові $R\le r_0<R_{\mathrm{ВЗ}}$, $R_{\mathrm{ВЗ}}$ – радіус сфери Вігнера-Зейтца.

Шукана хвильова функція матиме вигляд

$$\psi_k(\vec{r})=\sum_g b_g\Phi_g(\vec{r})\,. \quad (6)$$

Коефіцієнти b_g можуть бути знайдені з системи лінійних однорідних рівнянь

$$[(\vec{k}+\vec{g})^2-\varepsilon]b_g+\sum_{g'}\Gamma_{gg'}b_{g'}=0\,, \quad (7)$$

де $\Gamma_{gg'}=\dfrac{4\pi r_0^2}{L^3}\left\{-\left[\dfrac{\hbar^2}{2m_1}(\vec{k}+\vec{g})(\vec{k}+\vec{g}')-\varepsilon\right]\times\right.$

$$\times\frac{j_1(|\vec{g}-\vec{g}'|r_0)}{|\vec{g}-\vec{g}'|}+\frac{\hbar^2}{2m_0}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta_{gg'})\times$$

$$\left.\times j_\ell(|\vec{k}+\vec{g}|r_0)\,j_\ell(|\vec{k}+\vec{g}'|r_0)\frac{R'_\ell(\varepsilon,r_0)}{R_\ell(\varepsilon,r_0)}\right\}.$$

Прирівнюючи до нуля визначник системи рівнянь (7), отримаємо секулярне рівняння

$$\det\left|\left[(\vec{k}+\vec{g})^2-\varepsilon\right]\delta_{gg'}+\Gamma_{gg'}\right|=0\,, \quad (8)$$

яке використовують при знаходженні спектра власних значень енергії електрона $\varepsilon(\vec{k})$.

На рис.2 зображено результати розрахунків $\varepsilon(\vec{k})$ для надгратки КТ HgS у напівпровідниковій матриці CdS. Видно, що зі зменшенням періоду гратки збільшується ширина енергетичних зон і відбувається їх зсув у низькоенергетичну область. Це пояснюється зменшенням перекриття хвильових функцій електронів, що знаходяться у сусідніх КТ.

Із зменшенням розмірів КТ ширина зон суттєво зростає з одночасним зсувом у високоенергетичну область. Це зрозуміло з фізичних міркувань. Зменшення розмірів КТ приводить до сильнішого розмірного квантування, яке супроводжується зростанням повної енергії електронів, що й полегшує тунелювання в матрицю, а отже і зростання інтегралу перекриття хвильових функцій.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Алферов Ж.И.* История и будущее полупроводниковых гетероструктур // ФТП. - 1998. - **32**, №1. - С.3-18.
2. *Цидильковский И.М.* Электроны и дырки в полупроводниках. - М.: Наука, 1972.