

## СПЕКТРИ ЕЛЕКТРОНІВ, ДІРОК ТА ЕКСИТОНІВ У КВАЗІДВОВИМІРНІЙ НАДГРАТЦІ ЦИЛІНДРИЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧОК

Методом приєднаних плоских хвиль досліджено спектр електронів, дірок та екситонів у надгратці циліндричних квантових точок (НЦКТ) з гранично слабким зв'язком квазічастинок між шарами. На прикладі НЦКТ GaAs у середовищі  $Al_xGa_{1-x}As$  показано, що спектр квазічастинок є сукупністю мінізон, енергії яких добре апроксимуються квадратичною залежністю від двовимірного квазіімпульсу. Знайдено залежність спектральних характеристик від геометричних параметрів НЦКТ (радіуса і висоти квантової точки, а також відстані між квантовими точками в окремому шарі).

The electron, hole and exciton spectra in superlattice of cylindrical quantum dots (*SCQD*) are studied using the augmented plane waves method for the weak binding of quasiparticles between different shells. For the example of GaAs *SCQD* embedded into  $Al_xGa_{1-x}As$  medium it is shown that the quasiparticles spectra consist of minibands. Their energies are well approximated by the square dependence on the two-dimensional quasimomentum. The spectral characteristics as functions of *SCQD* geometric parameters (radius and height of quantum dot and distance between quantum dots in separate shell) are obtained.

### Вступ

Останніми роками були створені та інтенсивно досліджуються масиви напівпровідникових квантових точок (КТ), які розташовані в об'ємі матриці достатньо періодично [1,2]. У залежності від методів створення періодичних структур КТ з'явилась можливість варіювати геометричними параметрами цих утворень, і відповідно змінювати їхні фізичні характеристики.

Для того, щоб цілеспрямовано отримувати необхідні властивості об'єктів нового типу, необхідно вивчити явища, що в них відбуваються. Отже, потрібно побудувати теорію основних квазічастинок та їхньої взаємодії між собою і з різними зовнішніми полями. Теорія електронів, дірок, екситонів, фононів та взаємодії цих квазічастинок між собою, а також з електричним та магнітними полями у квантових точках [3, 4], квантових дротах (КД) [5, 6], квантових ямах [7, 8] належить до області мезофізики. Вона інтенсивно розроблялася в останнє десятиріччя і досягла не тільки якісного, але й непоганого кількісного узгодження з експериментом.

Що ж до теорії спектра квазічастинок у масивах КТ і надгратках КТ зокрема, то вона знахо-

диться на початковій стадії розвитку. Наскільки відомо, для таких гетеросистем поки що відсутня теорія фононного спектра, а теорія спектра електронів, дірок та екситонів вже почала розвиватися на базі декількох моделей. У роботі [9] автори отримали енергетичний спектр екситону в масиві вертикально зв'язаних самоорганізованих квантових точок, а в [10, 11] методом приєднаних плоских хвиль досліджено спектр електронів і дірок у надгратці циліндричних квантових дріотів і спектр електронів у квазідвовимірній надгратці циліндричних квантових точок.

У даній роботі буде досліджено енергетичний спектр електронів і дірок, а також екситонів типу Сугано-Шінади в моделі надгратки напівпровідникових циліндричних квантових точок (НЦКТ), розташованих у шарах з такою достатньо великою відстанню між ними, що зв'язок квазічастинок у різних шарах можна вважати несуттєвим (гранично слабким).

**Спектри електрона і дірки у надгратці циліндричних квантових точок із гранично слабким зв'язком квазічастинок між шарами**

Розглянемо напівпровідникову надгратку, що складається з циліндричних квантових точок (ям),

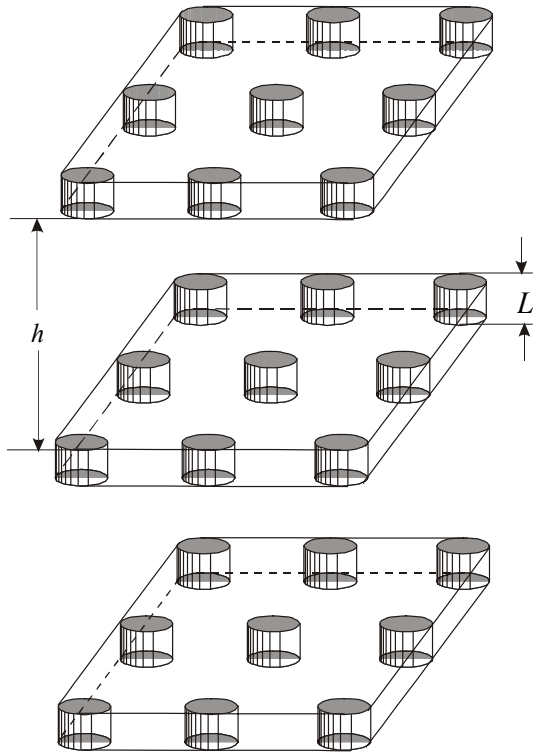


Рис. 1. Геометрична схема НЦКТ

розташованих у середовищі-матриці так, як показано на рис.1. Будемо вважати, що відомі всі геометричні параметри системи: радіус основи КТ –  $a$ , висота –  $L$ , відстані між основами КТ у двох сусідніх шарах –  $h$ , відстань між найближчими краями двох сусідніх КТ одного шару  $b$ , причому  $h \gg b$ . Оскільки розрахунок спектрів електрона і дірки далі буде виконуватися в наближенні ефективних мас, а при розрахунку екситонного спектра буде використовуватися модель діелектричного континууму, то повинні виконуватися такі фізичні умови, щоб геометричні розміри квантової точки і області простору між двома найближчими КТ значно перевищували розміри постійних елементарних комірок кристалів КТ  $a_d$  і середовища  $a_m$ , тобто

$$\sqrt[3]{a^2 L} \sim \sqrt[3]{b^2 L} \gg a_d \approx a_m. \quad (1)$$

Отже, ефективні маси електрона (легкої і важкої дірок) в КТ і середовищі-матриці (СМ) вважаються відомими  $\mu_{de}(\mu_{dlh}, \mu_{dhh})$  та  $\mu_{me}(\mu_{mlh}, \mu_{mhh})$  і дорівнюють масам, якими ці квазічастинки характеризуються у відповідних масивних кристалах. У декартовій системі координат з віссю  $OZ$  вздовж аксіальної осі однієї з КТ і площиною  $XOY$ , що проходить через середину висоти циліндра,

$$\mu_{e,h} = \begin{cases} \mu_{de, lh, hh} & \text{при } x, y, z \text{ в КТ} \\ \mu_{be, lh, hh} & \text{при } x, y, z \text{ ззовні КТ} \end{cases} \quad (2)$$

Постійні ґратки обох кристалів, з яких складається система, дуже близькі за величиною  $a_d \approx a_m$ . Тому потенціальні енергії електрона і дірки можна вважати заданими у вигляді

$$U_{e,h} = \begin{cases} -U_{de,h} & \text{при } x, y, z \text{ в КТ} \\ -U_{me,h} & \text{при } x, y, z \text{ ззовні КТ} \end{cases}, \quad (3)$$

де  $U_{de,h}$  і  $U_{me,h}$  – потенціальні енергії електрона і дірки у відповідних середовищах відносно вакууму, які вважаються відомими.

Щоб знайти спектр екситонів, спочатку необхідно отримати спектр і хвильові функції електрона та дірки. З цією метою розв'язується рівняння Шредінґера

$$H_{e, lh, hh} \Psi_{e, lh, hh} = E_{e, lh, hh} \Psi_{e, lh, hh} \quad (4)$$

з гамільтоніаном

$$H_{e, lh, hh} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\mu_{e, lh, hh}} \nabla^2 + U_{e, h}. \quad (5)$$

Оскільки подальші міркування еквівалентні для електрона, легкої і важкої дірок, розглянемо їх на прикладі електрона. Враховуючи, що розглядається система з гранично слабким зв'язком між квазічастинками в різних шарах, відобразимо це тим, що будемо вважати неможливим вихід електрона за межі кожного окремого шару товщиною  $L$ .

Хвильову функцію електрона в декартовій системі координат із віссю  $OZ$  вздовж аксіальної осі КТ можна зобразити у вигляді

$$\Psi_e = \Psi_{\parallel}(x, y) \sqrt{\frac{2}{L}} \begin{cases} \cos \frac{\pi n}{L} z, & n=1, 3, \dots \\ \sin \frac{\pi n}{L} z, & n=2, 4, \dots \end{cases} \quad (6)$$

Відділивши в рівнянні Шредінґера (4)  $z$ -у компоненту, отримаємо рівняння для "плоскої" складової в полярній системі координат із початком у центрі однієї з КТ. Розв'язок повинен задовольняти умову періодичності Блоха з потенціалом  $V_e = U_{de} - U_{me}$ .

Тепер, згідно з модифікованим (на випадок плоскої системи) методом приєднаних плоских хвиль (ППХ) [11] "плоска" складова хвильової функції електрона в надґратці утворюється лінійною комбінацією функцій Бесселя, "зшитих" із плоскими хвилями, розкладеними також за функціями Бесселя

$$\Psi_{n\bar{k}_{\parallel}}(\bar{\rho}) = \sum_{\bar{g}} \frac{c_{\bar{k}_{\parallel} - \bar{g}}}{\sqrt{\Omega}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m e^{im(\varphi - \varphi_{\bar{k}_{\parallel} - \bar{g}})} \times$$

$$\times \begin{cases} \frac{J_m(|\vec{k}_{\parallel} - \vec{g}|a)}{J_m(\alpha_{ne}a)} J_m(\alpha_{ne}\rho), & \rho \leq a \\ J_m(|\vec{k}_{\parallel} - \vec{g}|\rho), & \rho > a. \end{cases} \quad (7)$$

Тут 
$$\alpha_{ne} = \sqrt{\frac{2\mu_{de}}{\hbar^2}(V_e + E) - \frac{\pi^2 n^2 \mu_{de}}{L^2 \mu_e}},$$

$$\frac{1}{\mu_e} = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\mu_{de}} + \frac{1}{\mu_{me}} \right), \quad m=0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

$J_m(\alpha_{ne}\rho)$  – функції Бесселя,  $\Omega$  – об'єм плоскої елементарної комірки,  $\vec{k}_{\parallel}$  – двовимірний хвильовий вектор плоскої оберненої ґратки,  $|\vec{k}_{\parallel} - \vec{g}|$  і  $\varphi_{\vec{k}_{\parallel} - \vec{g}}$  – полярні координати вектора  $\vec{k}_{\parallel} - \vec{g}$ .

Коефіцієнти розкладу  $c_{\vec{k}_{\parallel} - \vec{g}}$  знаходяться з умови мінімуму функціонала енергії, що приводить до системи рівнянь

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2\mu_{me}} (\vec{k}_{\parallel} - \vec{g})^2 - E + \frac{\pi^2 n^2 \mu_{de}}{L^2 \mu_e} \right\} c_{\vec{k}_{\parallel} - \vec{g}} + \sum_{\vec{g}'} \Gamma_{\vec{g}\vec{g}'} c_{\vec{k}_{\parallel} - \vec{g}'} = 0, \quad (8)$$

вираз для  $\Gamma_{\vec{g}\vec{g}'}$  через свою громіздкість не наводиться.

Умова нетривіальності розв'язку системи (8) приводить до секулярного рівняння, з якого й визначається енергетичний спектр електрона  $E_e(\vec{k}_{\parallel})$  у межах глибини квантової ями. Аналогічно визначається й енергетичний спектр легкої  $E_{lh}(\vec{k}_{\parallel})$  і важкої  $E_{hh}(\vec{k}_{\parallel})$  дірок.

Конкретні розрахунки й дослідження спектра електрона, легкої та важкої дірок виконувались для НЦКТ GaAs, розташованих у середовищі-матриці  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .

Числовий розрахунок енергій мінізон електрона, легкої і важкої дірок як функцій величини квазіімпульсу  $|\vec{k}_{\parallel}|$  показує, що для досліджуваної НЦКТ всі вони добре апроксимуються квадратичною залежністю

$$\begin{aligned} E_e(|\vec{k}_{\parallel}|) &= E_{0e} + \frac{\hbar^2 |\vec{k}_{\parallel}|^2}{2m_e}; \\ E_{lh}(|\vec{k}_{\parallel}|) &= E_{0lh} + \frac{\hbar^2 |\vec{k}_{\parallel}|^2}{2m_{lh}}; \\ E_{hh}(|\vec{k}_{\parallel}|) &= E_{0hh} + \frac{\hbar^2 |\vec{k}_{\parallel}|^2}{2m_{hh}}. \end{aligned} \quad (9)$$

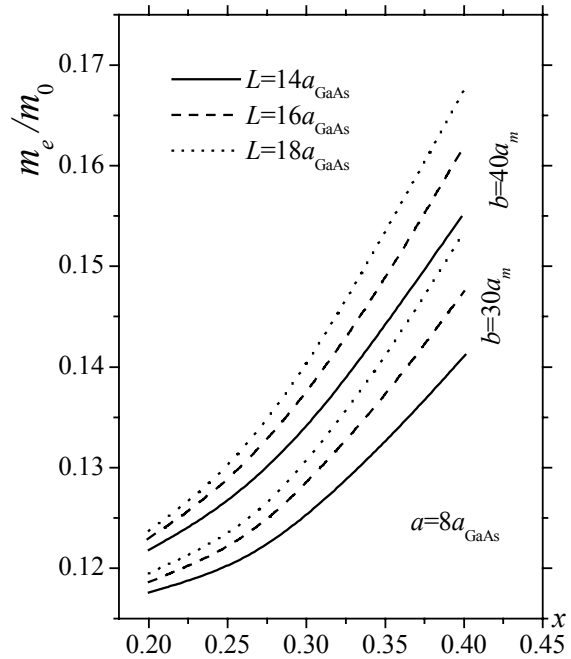


Рис.2. Залежності ефективної маси електрона від концентрації  $x$  Al для різних значень висоти  $L$  і відстані  $b$  між циліндричними квантовими точками

На рис.2 зображені розраховані залежності ефективної маси електрона від концентрації  $x$  Al при різних значеннях висоти  $L$  і відстані  $b$  між циліндричними квантовими точками. З рисунка видно, що збільшення  $x$  при довільних  $L$  і  $b$  збільшує ефективну масу електрона. Це зрозуміло, оскільки збільшення  $x$  збільшує рівень (висоту) потенціального бар'єра для електрона, затруднюючи його рух у НЦКТ.

При фіксованій концентрації  $x$  збільшення висоти  $L$  чи відстані  $b$  між квантовими точками також приводить до збільшення ефективної маси електрона, оскільки обидва фактори зумовлюють ефективне збільшення "потужності" потенціального бар'єра. Дійсно, збільшення висоти КТ при  $x = \text{const}$  і  $b = \text{const}$  спричинює збільшення об'єму квантової ями, що опускає енергетичні рівні відповідних мінізон, тобто збільшує висоту бар'єра, а збільшення  $b$  при  $x = \text{const}$  і  $L = \text{const}$  еквівалентне збільшенню ширини потенціального бар'єра.

Оскільки якісних відмінностей у поведінці ефективних мас електрона, легкої та важкої дірок в залежності від геометричних параметрів НЦКТ та концентрації  $x$  немає, то відповідні залежності для легкої та важкої дірки не наводяться.

#### Екситон Сугано-Шінади в НЦКТ

Оскільки електрон, легка чи важка дірка у НЦКТ з гранично слабким зв'язком між квазічастинками в сусідніх шарах КТ здійснюють квазі-

плоский рух із квазіімпульсом  $\vec{k}_{||}$  і у відповідних мінізонах характеризуються відомими двовимірними ефективними масами  $m_e$ ,  $m_{lh}$  і  $m_{hh}$ , то це дозволяє знайти спектр і хвильові функції зв'язаних станів цих квазічастинок.

Теоретичні моделі розрахунку спектра екситона, утвореного взаємодією електрона з легкою чи важкою діркою зовсім еквівалентні. Тому подальші міркування ми приведемо на прикладі утворення зв'язаного стану електрона і легкої дірки.

Будемо вважати, що електрон і легка дірка з радіус-векторами  $\vec{\rho}_e$  і  $\vec{\rho}_{lh}$  у системі  $XOY$  (в площині, перпендикулярній аксіальній осі КТ) взаємодіють між собою з потенціальною енергією

$$V(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_{lh}) = -\frac{e^2}{\varepsilon|\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_{lh}|}, \quad (10)$$

де

$$\varepsilon = \begin{cases} \varepsilon_d & \text{при } x, y, z \text{ в КТ} \\ \varepsilon_m & \text{при } x, y, z \text{ ззовні КТ} \end{cases} \quad (11)$$

діелектрична проникність НЦКТ.

Тоді рівняння Шредінгера для взаємодіючих електрона і легкої дірки в НЦКТ набуває вигляду

$$\left[ \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=e, lh} \frac{1}{m_i} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} \right) + \frac{e^2}{\varepsilon|\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_{lh}|} - E_{ex} \right] F(\vec{\rho}_e, \vec{\rho}_{lh}) = 0, \quad (12)$$

де  $F(\vec{\rho}_e, \vec{\rho}_{lh})$  – хвильова функція електронно-діркової пари,

$$\frac{1}{\varepsilon} = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\varepsilon_d} + \frac{1}{\varepsilon_m} \right).$$

Задача про знаходження енергетичного спектра і хвильових функцій "плоского" екситону розв'язана Сугано і Шінадою. Розв'язок рівняння (12) визначає закон дисперсії двовимірного "легкого" екситону

$$E_{exl}^p(|\vec{k}_{||}|) = E_{exl}^p + \frac{\hbar^2 |\vec{k}_{||}|^2}{2m_{exl}}. \quad (13)$$

Тут  $m_{exl} = m_e + m_{lh}$  – ефективна маса "легкого" екситону, енергія екситонного збудження  $E_{exl}^p$  у станах  $p=0, 1, 2, \dots, \infty$  визначається виразом

$$E_{exl}^p = E_{gGaAs} + E_{0e} + E_{0lh} - \Delta E_{exl}^p, \quad (14)$$

де  $E_{0e}$ ,  $E_{0lh}$  – енергії дна електронної і діркової

зон, відповідно визначені в попередньому параграфі,

$$\Delta E_{exl}^p = \frac{M_l e^4}{2\hbar^2 \varepsilon^2 \left(p + \frac{1}{2}\right)^2} \quad (15)$$

– енергія зв'язку двовимірного екситону у станах  $p=0, 1, 2, \dots, \infty$ , а

$$M_l = \frac{m_e m_{lh}}{m_e + m_{lh}} \quad (16)$$

– приведена маса цього екситону в НЦКТ.

Аналогічно визначається енергія зв'язку  $\Delta E_{exh}^p$ , ефективна маса  $m_{exh}$  і енергія збудження  $E_{exh}^p$  "важкого" екситону, що виникає через взаємодію електрона з важкою діркою.

Зауважимо, що якісних відмінностей у поведінці легкого і важкого екситонів у НЦКТ немає, тому далі будуть проаналізовані конкретні розрахунки (виконані на ЕОМ) енергії зв'язку  $\Delta E_{exl}^0$

(рис.3) й енергії збудження  $E_{exl}^0$  (рис.4) легкого екситону в основному стані в залежності від концентрації  $x$  Al при різних значеннях геометричних характеристик НЦКТ GaAs у матриці  $Al_xGa_{1-x}As$ .

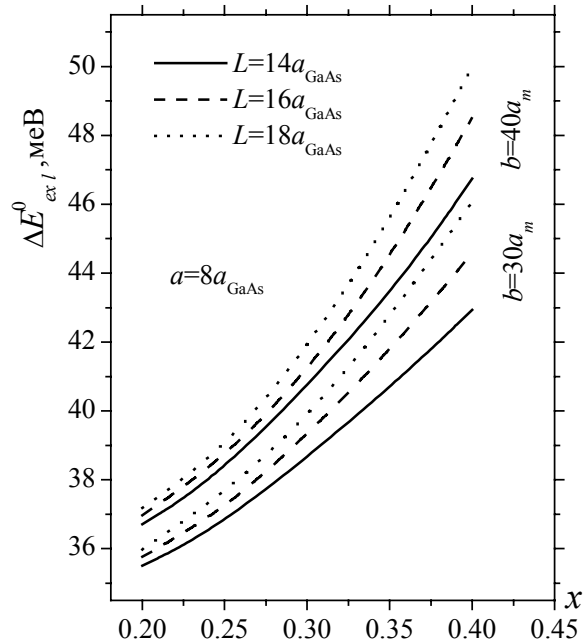


Рис.3. Залежності енергії зв'язку  $\Delta E_{exl}^0$  легкого екситону від концентрації  $x$  Al для різних значень висоти  $L$  і відстані  $b$  між циліндричними квантовими точками

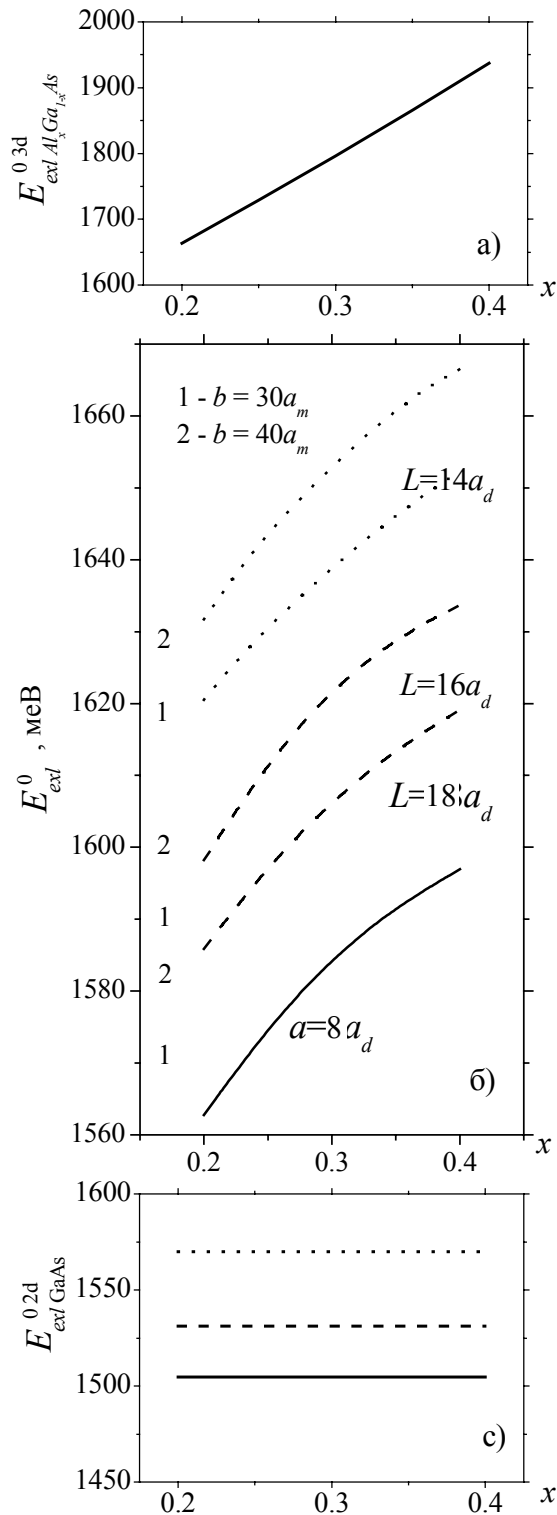


Рис.4. Залежності енергії екситонного збудження легкого екситону від концентрації  $x$  Al для різних значень висоти  $L$  і відстані  $b$  між циліндричними квантовими точками, обчислені за трьома моделями: тривимірною моделлю Ваньє-Мотта (а), квазідвовимірною моделлю Сугано-Шінади (б), моделлю надгратки циліндричних квантових точок (с).

Збільшення концентрації  $x$  Al при  $b=\text{const}$  і  $L=\text{const}$  завжди приводить до збільшення енергії зв'язку "легкого" і "важкого" екситонів (рис.3) і їхньої енергії збудження (рис.4б). Це пояснюється тим, що збільшення  $x$  спричинює збільшення висоти (рівня) потенціального бар'єра для електрона, легкої і важкої дірок, що сприяє зближенню цих квазічастинок і більшій їх локалізації в області КТ, збільшуючи їхню енергію зв'язку в екситон. Крім того, збільшення концентрації  $x$  значно зсуває мінізони електрона, легкої і важкої дірок в область більших енергій, що зумовлює збільшення енергії екситонного збудження. З цієї ж причини зростає енергія екситонного збудження при збільшенні відстані між ЦКТ  $b$  ( $x=\text{const}$ ,  $L=\text{const}$ ) і зменшенні її висоти  $L$  при  $x=\text{const}$  і  $b=\text{const}$  (рис.4,б).

Зменшення енергії зв'язку  $\Delta E_{exl}^0$  легкого (важкого) екситону при зменшенні  $b$  при  $x=\text{const}$ ,  $L=\text{const}$  і  $L$  при  $x=\text{const}$ ,  $b=\text{const}$  зрозуміло з фізичних міркувань. Дійсно, обидва фактори приводять до ефективного зменшення "потужності" потенціального бар'єра для електрона, легкої чи важкої дірки, в першому випадку зменшуючи його ширину, а в другому – зсуваючи електронні (діркові) мінізони в область більших енергій. Це зумовлює виштовхування електронної (діркової) хвильової функції з потенціальної ями і, відповідно сприяє зменшенню локалізації цих квазічастинок в області КТ, зменшуючи у такий спосіб їхню енергію зв'язку.

На рис.4 зображено залежності від концентрації  $x$  Al енергії екситонних збуджень легких екситонів, обчислених у межах трьох моделей: тривимірної моделі Ваньє-Мотта  $E_{exl}^{03d}$  Al $_x$ Ga $_{1-x}$ As (рис.4а); квазідвовимірної моделі Сугано-Шінади  $E_{exl}^{02d}$  GaAs (рис.4с); моделі надгратки циліндричних квантових точок  $E_{exl}^0$  (рис.4б).

З рис.4 видно, що енергії легкого екситону за рівних умов розташовуються так, що  $E_{exl}^{02d}$  GaAs <  $E_{exl}^0$  <  $E_{exl}^{03d}$  Al $_x$ Ga $_{1-x}$ As. При цьому енергія квазідвовимірних екситонів не залежить від  $x$ , а лише від геометричних розмірів шару (висоти) циліндричних КТ (рис.4с), енергія екситонів Ваньє-Мотта лінійно і сильно (на 100 меВ при  $\Delta x \sim 0,1$ ) залежить від  $x$ , а енергія екситону в НЦКТ плавно залежить від  $x$  і величина її зміни невелика ( $1 \div 10$  меВ при  $\Delta x \sim 0,1$ ).

Суттєва різниця у величинах зміни енергій екситонів у моделях Ваньє-Мотта і НЦКТ зумовлена тим, що в першій моделі  $E_{exlAl_xGa_{1-x}As}^{03d}$  практично визначається величиною забороненої зони  $E_{gAl_xGa_{1-x}As}^{3d}$ , в той час як в другій  $E_{exl}^0$  – складною залежністю як від глибини потенціальних ям, так і від величини ефективних мас квазі-частинок, що утворюють екситон у НЦКТ.

Робота частково підтримана фондом SNSF (грант 7SUPJ062181).

#### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Алфёров Ж.И., История и будущее полупроводниковых гетероструктур // ФТП. - 1998. - **32**, №1. - С.3-18.
2. Леденцов Н.Н., Устинов В.М., Щукин В.А. и др. Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры. Обзор // ФТП. - 1998. - **32**, №4. - С.385-410.
3. Ткач Н.В. Электрон-фононное взаимодействие в сферических наногетероструктурах // ФТТ. - 1997. - **39**, №6. - С.1109-1113.
4. Schooss D., Mews A., Eychemuller A., Weller H. Quantum dot quantum well CdS/HgS/CdS: theory and experiment // Phys. Rev. B - 1994. - II.-**49**, No. 24. - P.17072-17078.
5. 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.
6. Constantinou N.C., Ridley B.K. Guided and interface LO phonons in cylindrical GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wires // Phys. Rev. B. - 1990. - **41**, No.15. - P.10627-10631.
7. Mori N., Ando T. Electron-optical-phonon interaction in single and double heterostructures // Phys. Rev. B. - 1989. - **40**, No.9. - P.6175-6188.
8. Hai G.Q., Peeters F.M., Devreese J.T., Wendler L. Screening of the electron-phonon interaction in quasi-one dimensional semiconductor structures // Phys. Rev. B. - 1993. - **48**, No.16. - P.12016-12022.
9. Andreev A.D., O'reilly E.P. A theoretical study of exciton binding energies in coupled InGaAs/GaAs self-organised quantum dots // Excitonic Processes in Condensed Matter (Electrochemical Proc. Ser. PV 98-25) ed R T Williams and W.M. Yen (Princeton, NJ: Electrochemical Society) 1998. - P.272-280.
10. Головач В.Н., Зегря Г.Г., Маханець А.М., Пронишин И.В., Ткач Н.В. Спектры электронов и дырок в сверхрешётке цилиндрических квантовых проволок // ФТП. - 1999. - **33**, №5. - С.603-607.
11. Tkach N.V., Makhanets A.M., Zegrya G.G. Energy spectrum of electron in quasilattice superlattice of cylindrical quantum dots // Semicond. Sci. Technol.- 2000. - No.15. - P.395-398.