УДК 538.958; 538.971

© 2002р. М.В. Ткач, Я.М. Березовський

Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, Чернівці

КВАЗІСТАЦІОНАРНІ СТАНИ З *l*=1 У ВІДКРИТИХ СФЕРИЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧКАХ

Досліджуються квазістаціонарні стани електрона з *l*=1 у відкритій сферичній квантовій точці. Окрім зв'язаних квазістаціонарних станів, показано і розраховано так звані майже вільні квазістаціонарні стани електрона. Також обчислені часи життя електрона в цих станах.

The electron quasistationary states for *l*=1 are investigated in opened spherical quantum dots. Besides the bound quasistationary states there are observed and calculated the so called almost pure quasistationary electron states. The electron life times in these states are studied too.

Вступ

Закриті квантові точки (КТ) досліджуються вже тривалий період часу, і головні властивості спектрів квазічастинок у таких наногетероструктурах вивчені досить детально [1,2,3]. Що ж стосується відкритих КТ, то не зважаючи на те, що сучасними методами нанотехнології вони можуть отримуватися експериментально, теорія спектра (а тим більше взаємодії) квазічастинок у таких системах лише починає розвиватися [4,5].

У роботах [4,5] досліджувалися спектри електронів і дірок у відкритих сферичних квантових точках (СКТ) і в квантових дротах. Зокрема, там детально аналізувалися властивості центрально-симетричних резонансних квантових стаціонарних станів (*l*=0). Що ж до станів з *l*≠0, то хоча рівняння для *S*-матриці отримується в загальному вигляді для довільних значень орбітального квантового числа *l*, але детальний аналіз властивостей може бути виконаний лише при складних конкретних розрахунках, тому такий аналіз у роботах [4,5] не виконувався.

Із загальних міркувань зрозуміло, що оскільки при *l*≠0 роль потенціальної енергії відіграє ефективна потенціальна енергія, яка містить ще й доданок, який характеризує орбітальний момент ($U_l(r)=\dfrac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$), то з урахуванням залежності ефективної маси квазічастинки від її положення відносно центра СКТ можна очікувати нових властивостей у станах з *l*≠0 порівняно зі станами з *l*=0.

Мета цієї роботи полягає в тому, щоб дослідити квазістаціонарні стани електрона з *l*≠0 у відкритій СКТ. При цьому, зокрема, буде показано, що на відміну від сферично симетричних станів (*l*=0), при *l*≠0 існують умови, за яких електрон може локалізуватись у матеріалі-бар'єрі. Отже, він перебуває в резонансних квантових станах.

Гамільтоніан. Рівняння Шредінґера. *S*-матриця

Розглядається відкрита сферична наногетеросистема (КТ) при *l*≠0, яка складається з ядра-ями (0), шару-бар'єра (1) та середовища-ями (2). Геометрична схема системи та ефективна потенціальна енергія електрона в ній зображені на рис.1.

У сферичній системі координат із початком у центрі гетероструктури електрон характеризується ефективною масою $m(r)$ і ефективною потенціальною енергією $U_{ef}^{l\neq 0}(r)$, які є функціями відстані від центра наносистеми, оскільки в різних середовищах вони мають різні значення:

$$m(r)=\begin{cases} m_0, & r<r_0, r>r_1 \\ m_1, & r_0\le r\le r_1 \end{cases},$$

$$U_{ef}^{l\neq 0}(r)=U_{ef}^{l=0}(r)+U_i^{l\neq 0}(r),$$

де

$$U_{ef}^{l=0}(r)=\begin{cases} 0, & r<r_0, r>r_1 \\ U_e, & r_0\le r\le r_1 \end{cases},$$

$$U_i^{l\neq 0}(r)=\begin{cases} U_0^l, & r<r_0, r>r_1 \\ U_1^l, & r_0\le r\le r_1 \end{cases},$$

$$U_i^l=\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_i r^2}, \qquad (1)$$

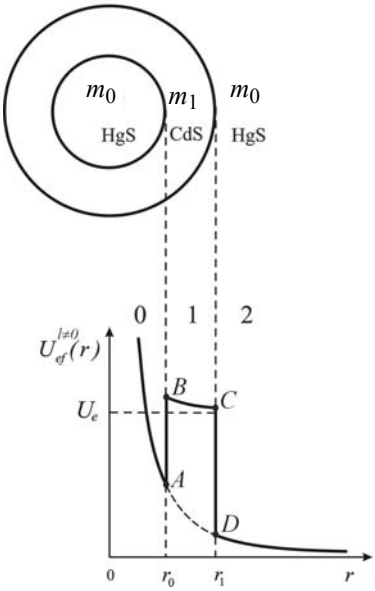

Рис.1. Геометрична схема та ефективний потенціальний бар'єр електрона при $l\neq 0$.

$U_{ef}^{l=0}(r)$ – ефективна потенціальна енергія електрона в різних середовищах при l=0 (рис.2б). U_i^l – енергія відцентрового руху в i-му середовищі (рис.2а).

У зв'язку із залежністю ефективної маси від r, рівняння Шредінґера записується так:

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

З урахуванням сферичної симетрії його розв'язок шукаємо у вигляді

$$\Psi(\vec{r})=R_l(r)Y_{lm}(\theta,\varphi), \qquad (3)$$

де l=0,1,2,..; m=0,±1,±2; $R_l(r)$ – радіальна хвильова функція.

$$R_l(r)=\begin{cases} R_l^{(0)}(r), & 0\le r<r_0 \\ R_l^{(1)}(r), & r_0\le r<r_1 \\ R_l^{(2)}(r), & r_1\le r<\infty \end{cases}. \qquad (4)$$

Підстановка (3) в (2) приводить до системи трьох однотипних рівнянь

$$\frac{\hbar^2}{2m_i r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_l^i(r)}{dr}\right)+(E-U_{ef}^{l\neq 0}(r))R_l^i(r)=0, \qquad (5)$$

i=0,1,2.

Подамо систему рівнянь (5) у вигляді:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_l^{(i)}}{dr}\right)+\left[K_i^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_l^{(i)}(r)=0, \qquad (6)$$

де (i=0,1,2),

$$K_i^2=\frac{2m_i}{\hbar^2}(E-U_i)=\begin{cases} k^2 & i=0,2 \\ -\chi^2 & i=1 \end{cases}. \qquad (7)$$

Розв'язками (6) є лінійні комбінації функцій Ханкеля від різних аргументів

$$R_l^{(0)}(r)=k\mathrm{A}_l^{(0)}\left[h_l^-(kr)+h_l^+(kr)\right],$$

$$R_l^{(1)}(r)=K_i\mathrm{A}_l^{(1)}\left[h_l^-(K_ir)-S_l^{(1)}h_l^+(K_ir)\right], \qquad (8)$$

$$R_l^{(2)}(r)=k\mathrm{A}_l^{(2)}\left[h_l^-(kr)-S_l(k)h_l^+(kr)\right].$$

Коефіцієнт $\mathrm{A}_l^{(2)}=1/\sqrt{2\pi}$, визначається з умови нормування радіальної хвильової функції [6]:

$$\int_0^\infty R_{lk}^*(r)\,R_{lk'}(r)r^2dr=\delta(k-k'). \qquad (9)$$

Решта невідомих коефіцієнтів $\mathrm{A}_l^{(i)}$, $S_l^{(1)}$ і матриця розсіяння S_l однозначно визначаються з системи граничних умов:

$$\left.\begin{aligned} &R_l^{(i)}(K_ir_i)=R_l^{(i+1)}(K_{i+1}r_i) \\ &\frac{1}{m_i}\frac{dR_l^{(i)}(K_ir)}{dr}\bigg|_{r=r_i}=\frac{1}{m_{i+1}}\frac{dR_l^{(i+1)}(K_{i+1}r)}{dr}\bigg|_{r=r_i} \end{aligned}\right\}, \qquad (10)$$

(i=0,1,2,3,4).

які забезпечують неперервність густини ймовірності та її потоку на обох межах гетеросистеми.

Система (10) розв'язується просто, звідки і визначається вираз для S_l-матриці, який через громіздкість ми не наводимо, а для прикладу подамо лише порівняно простий вираз S_l у випадку l=1.

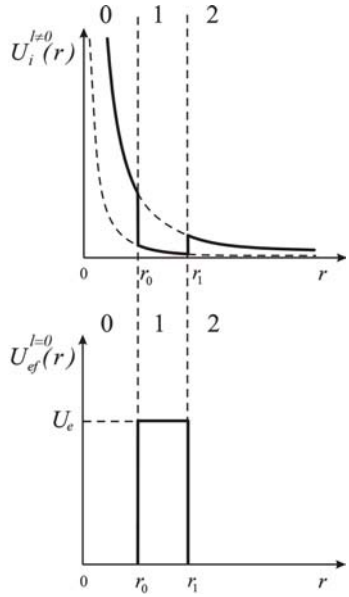

Рис.2. Енергія відцентрового руху (а), ефективна потенціальна енергія електрона при l=0 (б).

Тоді
$$S_1(k) = e^{-2ikr_1}\,\frac{im_1(k^2r_1^2 - 2(1+ikr_1))\xi_2 + m_0(-i+kr_1)\xi_3}{im_1(k^2r_1^2 - 2(1-ikr_1))\xi_2 - m_0(i+kr_1)\xi_3}, \qquad (11)$$

де
$$\xi_3 = e^{2\chi(r_1-r_0)}\xi_1(2+\chi r_1(-2+\chi r_1)) - (2+\chi r_1(2+\chi r_1)), \qquad (12)$$
$$\xi_2 = e^{2\chi(r_1-r_0)}\xi_1(-1+\chi r_1) + (1+\chi r_1), \qquad (13)$$
$$\xi_1 = \frac{(\sin(kr_0) - kr_0\cos(kr_0))[m_0(2+\chi r_0(2+\chi r_0)) - 2m_1(1+\chi r_0)] + m_1(1+\chi r_0)kr_0\sin(kr_0)}{(\sin(kr_0) - kr_0\cos(kr_0))[m_0(2+\chi r_0(-2+\chi r_0)) + 2m_1(-1+\chi r_0)] - m_1(-1+\chi r_0)kr_0\sin(kr_0)}, \qquad (14)$$

S_l – матриця має відомі із загальної теорії розсіяння [6] властивості. Зокрема, у комплексній площині квазіімпульсу $k=k'+ik''$ її модуль на дійсній осі (k') завжди дорівнює одиниці, а полюси (за винятком так званих "хибних") в нижній півплощині визначають квазістаціонарні стани частинки у полі потенціалу $U(r)$. У таких станах частинка характеризується енергією $E=\hbar^2(k')^2/2m_0$, яка знаходиться у смузі з півшириною, що визначається величиною k''. Скінченність півширини смуги означає, що у квазістаціонарному стані частинка перебуває протягом деякого скінченого часу життя ($\tau=\hbar/k''$), будучи локалізованою у області потенціальної ями, якщо її стан має резонансний характер (Брейта-Вігнера).

Властивості квазістаціонарних станів електрона при $l\neq0$ у відкритій сферичній квантовій точці (HgS/CdS/HgS)

Властивості квазістаціонарних станів електрона з $l\neq0$ будемо вивчати на прикладі відкритої сферичної наногетеросистеми HgS/CdS/HgS, фізичні параметри якої відомі (таблиця 1):

Таблиця.1. Фізичні параметри системи.

	$m_e(m_0)$	$U^e(eV)$	$a(A)$
CdS	0,2	1,35	5,818
HgS	0,036	0	5,851

Числовий розрахунок полюсів S-матриці в комплексній площині енергій дав можливість дослідити залежність енергій (E_{nl}) та часів життя (τ_{nl}) електрона у квазістаціонарних станах від геометричних параметрів відкритої СКТ.

На рис.3-5 наведені результати розрахунку енергій (E_{nl}) та часів життя (τ_{nl}) електрона у квазістаціонарних станах відкритої однобар'єрної сферичної наногетероструктури HgS/CdS/HgS у залежності від розміру ядра (r_0) при фіксованих товщинах бар'єра Δ. Як видно з рис.3,4,5, енергії (E_{nl}) та часи життя (τ_{nl}) електрона у відповідних станах як функції залежні від радіуса внутрішньої ями r_0 мають, загалом, немонотонний характер.

Причина цього явища зрозуміла з фізичних міркувань. Справді на рис.3,4,5 спостерігається ефект розштовхування енергетичних рівнів ("пляшкові горла"), де суцільними товстими лініями зображена залежність енергетичних рівнів даної наносистеми, а штриховими горизонтальними лініями позначено положення стаціонарних енергетичних рівнів умовної безмежно глибокої потенціальної ями (1) із відповідною шириною, що рівна ширині потенціального бар'єра Δ. Тонкими суцільними лініями на рис.3 зображено положення двох (A,C) характерних точок на кривій $U_{ef}^{l\neq0}$ в залежності від r_0, що полегшує розуміння еволюції електронного спектра.

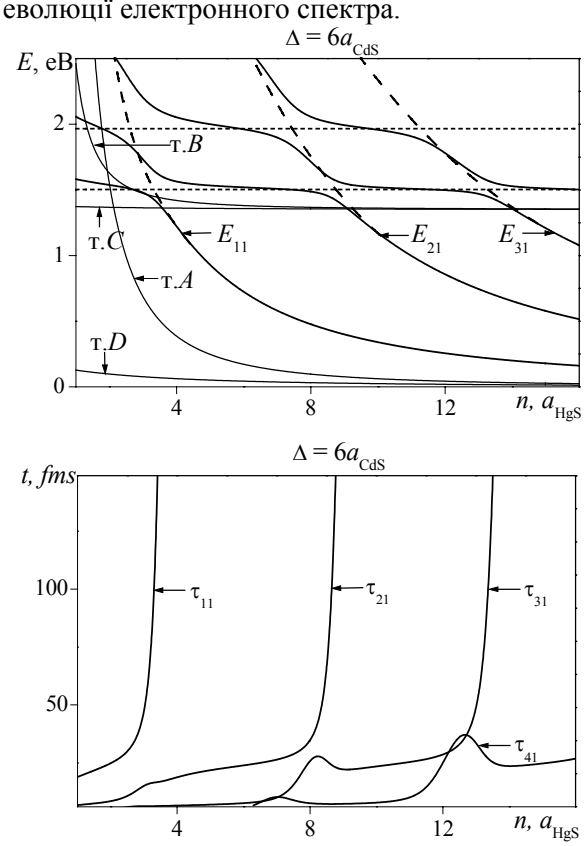

Рис.3. Енергетичний спектр і час життя електрона при $\Delta=6_{CdS}$.

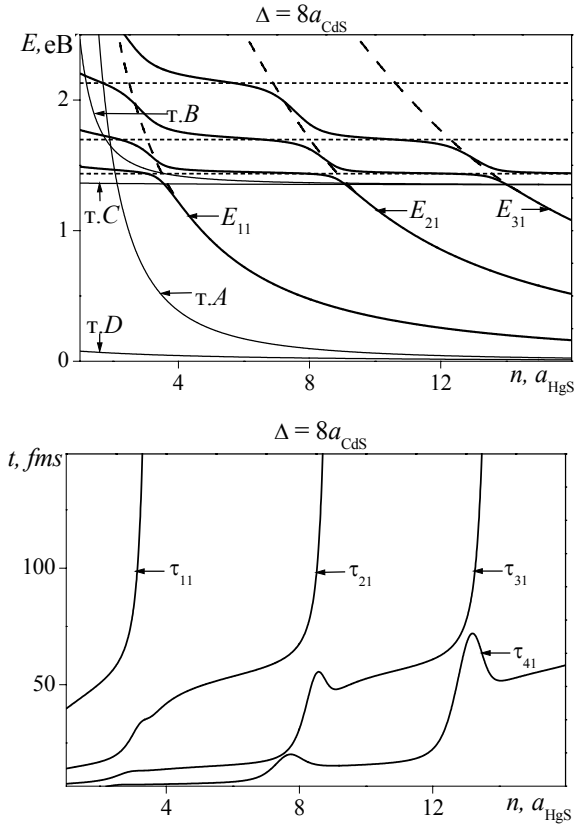

Рис.4. Енергетичний спектр і час життя електрона при $\Delta=8_{CdS}$.

Проаналізуємо поведінку енергетичних рівнів E_{n1} і часів життя τ_{n1} електрона у станах з l=1 у залежності від розміру ядра (r_0) при різних фіксованих товщинах (Δ) шару-бар'єра.

Як видно з рис.3,4,5, енергії E_{n1} та часи життя τ_{n1} електрона як функції r_0 мають немонотонний характер, зокрема спостерігається ефект розштовхування енергетичних рівнів.

Причина цього явища зрозуміла з фізичних міркувань. Справді, якби всі три шари наногетеросистеми були ізольованими між собою безмежно високими і тонкими потенціальними бар'єрами, то електронні стани в них були б стаціонарними, а спектр був би неперервним у матеріалі (2), дискретним і майже незалежним від r_0 у матеріалі (1) (короткі штрихові лінії на рис.3,4,5) та дискретним і квадратично спадним зі збільшенням r_0 у матеріалі (0) (довгі штрихові лінії на рис.3,4,5).

Оскільки складові наногетеросистеми не ізольовані, то перебування електрона в обох внутрішніх шарах залишає скінченою ймовірність його виходу у відкритий зовнішній простір (2), що приводить до скінченності часу його перебування у внутрішніх шарах системи, а отже, перетворює стани у квазістаціонарні. При цьому за законами квантової механіки у станах з однаковою симетрією за таких просторових параметрів обох внутрішніх шарів (0,1) системи, коли енергії у них зближаються, виникає ефект розштовхування рівнів, що й спостерігається на рис.3,4,5. Оскільки збільшення товщини (Δ) шару (1) еквівалентне збільшенню ширини "невзаємодіючої" безмежно глибокої ями, то це викликає "опускання" спектра зі зближенням енергетичних рівнів між собою та збільшення часу життя електрона в цих станах. Зрозуміло, що при достатньо великій товщині шару отримується майже неперервний спектр. І взагалі, якщо розглядати наногетеросистему HgS/CdS, то вище характерної точки *C*, яка відображає еволюцію максимальної висоти потенційної ями, утвориться неперевний спектр.

У цій роботі розроблена теорія розрахунку за допомогою матриці розсіяння S_l при l=1, що є основою для подальших досліджень особливостей енергетичного спектра та часу життя електрона в цих станах при l>0. Особливість полягає в тому, що завдяки великій різниці ефективних мас у різних середовищах при достатньо великих l у шарі-бар'єрі може утворитися потенціальна яма, що

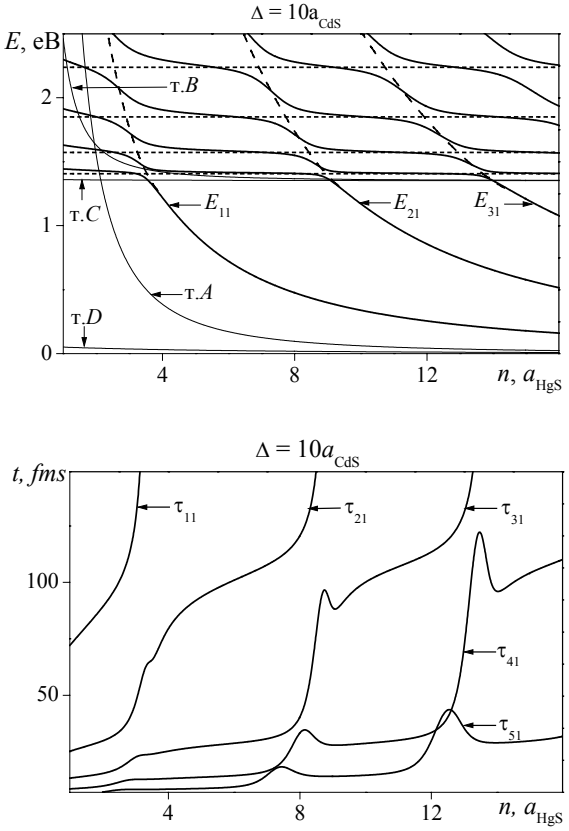

Рис.5 Енергетичний спектр і час життя електрона при $\Delta=10_{CdS}$.

наочно вже видно з рис.2а. У цій ситуації можуть виникнути резонансні квазістаціонарні стани, які можуть створювати виняткові можливості застосування в різних фізичних приладах.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Schooss D.*, *Mews A.*, *Eychmuller A.*, *Weller H.* Quantum dot quantum well CdS/HgS/CdS: theory and experiment // Phys. Rev. B - 1994. - II. - **49**, №24. - P.17072-17078.
2. *Mews A.*, *Kadavanich A.V.*, *Banin U.*, *Alivisatos A.P.* Structural and spectroscopic investigations of CdS/HgS/CdS quantum-dot quantum wells // Phys. Rev. B - 1996. - II. - **53**, № 20. - P.13242-13245.
3. *Ткач Н.В.*, *Войцеховская О.Н.*, *Головацкий В.А.*, *Михальова М.Я.* Спектры электронов и дырок в сложных сферических полупроводниковых наногетеросистемах // Известия вузов. Физика. - 1998. - **12**. - С.58-65.
4. *Ткач Н.В.*, *Головацкий В.А.* Квазистационарные состояния электрона в сферической наногетеросистеме HgS/CdS/HgS // ФТТ - 1999. - **41**, №11. - С.2081-2083.
5. *Ткач Н.В.*, *Головацкий В.А.*, *Войцеховская О.Н.* Особенности спектров электронов и дырок в открытой сферической наногетероструктуре (на примере GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs) // ФТП - 2000. -**34**, № 5. - С.602-606.
6. *Базь А.И.*, *Зельдович Я.Б.*, *Переломов А.М.* Рассеяния, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. - М.: Наука, 1971.
7. *Алфёров Ж.И.* История и будущее полупроводниковых гетероструктур // ФТП - 1998 - **32**, №1 - С.3-18.