

СПЕКТР ЕЛЕКТРОНА У ПЛОСКІЙ ВІДКРИТІЙ ГЕТЕРОСИСТЕМІ

Досліджена поведінка електрона в плоскій подвійній відкритій гетеросистемі з врахуванням різного значення ефективних мас електрона в різних середовищах. Визначені енергії та часи життя квазістаціонарних станів електрона в залежності від геометрії системи при різних значеннях поздовжнього квазіімпульсу.

The electron behaviour in the flat double open heterosystem with different effective of it masses of it in different surroundings is investigated. Energy and time of life of quasistationary are determined depending on geometry of the system in various significanses of lengthwise quasiimpulse.

Стрімкий розвиток технологій виробництва напівпровідникових матеріалів, що дозволили отримувати кристали з лінійними розмірами, зіставними з довжиною хвилі де Бройля квазічастинок, привів до створення нових об'єктів, так званих наногетеросистем, що володіють принципово відмінними властивостями, порівняно з масивними кристалами. Піонерські роботи з дослідження квазічастинкових спектрів у таких системах датовані 80-ми роками минулого століття. З того часу питома вага публікацій з вказаної тематики – мезофізики та наноелектроніки – лише зростає.

Все більше зростає інтерес дослідників до наногетеросистем відкритого типу [1,2], основна особливість яких полягає в тому, що потенціальна енергія квазічастинки в зовнішньому середовищі найнижча. Дана обставина зумовлює квазістаціонарний характер спектра, що характеризується скінченним часом життя внаслідок можливості проникнення частинки через потенціальні бар'єри і покидання нею системи. Ця та інші унікальні властивості відкритих систем, як очікується, уможливить використання їх як елементарної бази для нових приладів, зокрема ЕОМ нового покоління.

Предметом дослідження багатьох робіт є циліндричні та сферичні наногетеросистеми. Так, у [3-4] теоретично досліджувався спектр електронів і дірок у відкритій сферичній, а в [5] – циліндричній гетеросистемі.

Мета роботи – теоретичне вивчення квазістаціонарного спектра електрона в плоскій гетеросистемі, в якій можливий вільний рух електрона

паралельно до границь розділення середовищ. Наявність квазіімпульсу електрона, що визначає цей рух, ускладнить розв'язування поставленої задачі в порівнянні з аналогічними в сферичних і циліндричних системах, які володіли більш високою симетрією.

Розглянемо відкриту подвійну плоску гетеросистему. Вона складається з тонкої плівки, товщина якої a , розміщеної між двома також плоскими плівками з шириною b кожна.

Для зручності опису такої системи введемо систему координат так, щоб площина xOy була паралельною границям розділу середовищ і збігалася з площиною симетрії внутрішнього шару, а вісь Oz – перпендикулярною до них (рис.1).

Потенціальна енергія електрона в оточуючих плівках U_0 більша, ніж в центральному шарі. Вся наногетеросистема знаходиться в середовищі, потенціальна енергія електрона в якому така сама, як у внутрішньому шарі, тобто розглядається відкрита система. Прикладом такої системи може бути CdS/HgS/CdS, поміщена в середовище HgS.

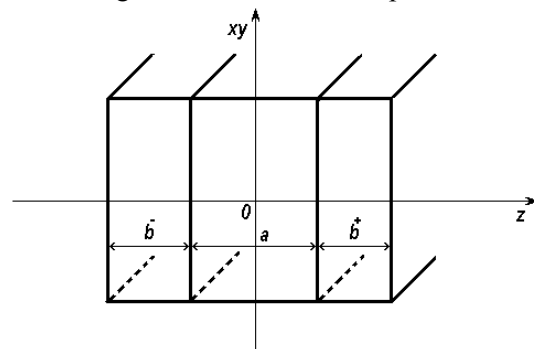


Рис.1. Геометрія подвійної гетероструктури.

У вибраній системі координат залежність ефективної маси $\mu(z)$ та потенціальної енергії $U(z)$ електрона від координати z така:

$$\mu(z) = \begin{cases} \mu_0, & z \leq \left(-\frac{a}{2} - b\right), \\ \mu, & -b \leq z \leq -\frac{a}{2}, \\ \mu_0, & -\frac{a}{2} \leq z \leq \frac{a}{2}, \\ \mu, & \frac{a}{2} \leq z \leq \left(\frac{a}{2} + b\right), \\ \mu_0, & \left(\frac{a}{2} + b\right) \leq z. \end{cases} \quad (1)$$

$$U(z) = \begin{cases} 0, & z \leq \left(-\frac{a}{2} - b\right), \\ U_0, & \left(-\frac{a}{2} - b\right) \leq z \leq -\frac{a}{2}, \\ 0, & -\frac{a}{2} \leq z \leq \frac{a}{2}, \\ U_0, & \frac{a}{2} \leq z \leq \frac{a}{2} + b, \\ 0, & \left(\frac{a}{2} + b\right) \leq z. \end{cases} \quad (2)$$

Через залежність ефективної маси електрона від змінної z рівняння Шредінгера, розв'язки якого визначають спектр квазічастинки, повинно бути модифікованим і тому набуває вигляду:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{\mu(z)} \vec{\nabla} + U(z)\right) \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z). \quad (3)$$

Врахування плоскої симетрії дає можливість розділення змінних, тому шукана хвильова функція може бути подана як добуток двох функцій, одна з яких залежить лише від координати електрона в площині xOy , інша – лише від змінної z :

$$\Psi(x, y, z) = \frac{1}{L} e^{i\vec{k}_{\parallel} \vec{r}_{\parallel}} \varphi(z). \quad (4)$$

У (4) прийнято наступні позначення: \vec{k}_{\parallel} – квазіімпульс електрона при русі в площині XOY , \vec{r}_{\parallel} – радіус вектор, що задає положення електрона в цій площині, L – нормуючий множник.

У результаті підстановки (4) в (3) отримується рівняння для $\varphi(z)$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{\mu(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2\mu(z)}\right) \varphi_{k_{\parallel}}(z) = E \varphi_{k_{\parallel}}(z). \quad (5)$$

Наявність у рівнянні для $\varphi(z)$ квазіімпульсу електрона \vec{k}_{\parallel} , що відповідає за вільний рух електрона в площині, перпендикулярній до осі z , вказує на залежність від швидкості цього руху квантової енергії електрона в потенціальній ямі. Тобто при відмінному від нуля квазіімпульсі \vec{k}_{\parallel} , рух електрона відбувається в полі ефективної потенціальної енергії:

$$U_{ef} = U(z) + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2\mu(z)}.$$

Оскільки потенціальна енергія симетрична, то рівняння (5) інваріантне відносно перетворення інверсії $z \rightarrow -z$. Дана обставина дозволяє розглядати (5) лише для додатних значень z . Крім того розв'язками цього рівняння можуть бути тільки парні або непарні функції.

Враховуючи в (5) конкретні значення потенціальної енергії в усіх (тепер уже трьох) областях, для хвильової функції $\varphi(z)$ запишемо розв'язки у вигляді парних (6) та непарних (7) функцій:

$$\varphi^+(z) = \begin{cases} A_1^+ \cos \quad 0z, & |z| < \frac{a}{2}, \\ A_2^+ e^{-z} + B_2^+ e^z, & \frac{a}{2} < |z| < \frac{a}{2} + b, \\ A_3^+ e^{-i \quad 0z}, & |z| > \frac{a}{2} + b, \end{cases} \quad (6)$$

$$\varphi^-(z) = \begin{cases} A_1^- \sin \quad 0z, & |z| < \frac{a}{2}, \\ A_2^- e^{-z} + B_2^- e^z, & \frac{a}{2} < |z| < \frac{a}{2} + b, \\ A_3^- e^{-i \quad 0z}, & |z| > \frac{a}{2} + b, \end{cases} \quad (7)$$

де

$$\varepsilon_0^2 = \frac{2\mu_0}{\hbar^2} E - k_{\parallel}^2,$$

$$\varepsilon^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - U) - k_{\parallel}^2. \quad (8)$$

Значення енергії квазістаціонарних станів і часи їх життя, пов'язані з півшириною, будемо шукати окремо для парних (6) і непарних (7) станів як розв'язки дисперсійних рівнянь, які отримаємо, вимагаючи неперервності хвильової функції та потоку густини ймовірності на границях розділення середовищ. Через залежність ефективної маси електрона від координати z для отримання умови неперервності потоку густини ймовірності

необхідно прирівнювати похідні від хвильової функції з відповідним нормувальним множником $1/\mu$. Виконуючи цю процедуру окремо для парних і непарних хвильових функцій, отримаємо дві системи з чотирьох рівнянь кожна, що містять по чотири невідомих, що входять в (6) та (7):

$$\begin{cases} A_1^+ \cos \alpha_0 z_1 = A_2^+ e^{-\alpha z_1} + B_2^+ e^{\alpha z_1} \\ -\frac{\alpha_0}{\mu_0} A_1^+ \sin \alpha_0 z_1 = \frac{\alpha}{\mu} (-A_2^+ e^{-\alpha z_1} + B_2^+ e^{\alpha z_1}) \\ A_2^+ e^{-\alpha z_2} + B_2^+ e^{\alpha z_2} = A_3^+ e^{-i\alpha_0 z_2} \\ \frac{\alpha}{\mu} (-A_2^+ e^{-\alpha z_2} + B_2^+ e^{\alpha z_2}) = -\frac{i\alpha_0}{\mu_0} A_3^+ e^{-i\alpha_0 z_2} \end{cases}, (9)$$

$$\begin{cases} A_1^- \sin \alpha_0 z_1 = A_2^- e^{-\alpha z_1} + B_2^- e^{\alpha z_1} \\ \frac{\alpha_0}{\mu_0} A_1^- \cos \alpha_0 z_1 = \frac{\alpha}{\mu} (-A_2^- e^{-\alpha z_1} + B_2^- e^{\alpha z_1}) \\ A_2^- e^{-\alpha z_2} + B_2^- e^{\alpha z_2} = A_3^- e^{-i\alpha_0 z_2} \\ \frac{\alpha}{\mu} (-A_2^- e^{-\alpha z_2} + B_2^- e^{\alpha z_2}) = -\frac{i\alpha_0}{\mu_0} A_3^- e^{-i\alpha_0 z_2} \end{cases}, (10)$$

Тут $z_1=a/2$, $z_2=a/2+b$. Для зручності також введемо позначення $k = \frac{\alpha_0 \mu}{\alpha \mu_0}$.

Системи рівнянь (9) та (10) – системи лінійних однорідних рівнянь і, відповідно, мають нетривіальний розв'язок, лише коли визначник їх дорівнює нулю, а саме:

$$\begin{vmatrix} \cos \alpha_0 z_1 & -e^{-\alpha z_1} & -e^{\alpha z_1} & 0 \\ k \sin \alpha_0 z_1 & -e^{-\alpha z_1} & -e^{\alpha z_1} & 0 \\ 0 & e^{-\alpha z_2} & e^{\alpha z_2} & -e^{-i\alpha_0 z_2} \\ 0 & e^{-\alpha z_2} & -e^{\alpha z_2} & -ike^{-i\alpha_0 z_2} \end{vmatrix} = 0, (11)$$

$$\begin{vmatrix} \sin \alpha_0 z_1 & -e^{-\alpha z_1} & -e^{\alpha z_1} & 0 \\ k \cos \alpha_0 z_1 & e^{-\alpha z_1} & -e^{\alpha z_1} & 0 \\ 0 & e^{-\alpha z_2} & e^{\alpha z_2} & -e^{-i\alpha_0 z_2} \\ 0 & -e^{-\alpha z_2} & e^{\alpha z_2} & ike^{-i\alpha_0 z_2} \end{vmatrix} = 0. (12)$$

Розкривши визначники у (11-12), отримаємо дисперсійні рівняння для знаходження енергії парних і непарних станів відповідно:

$$\cos \alpha_0 z_1 \left[(ik+1) + (ik-1)e^{2\alpha(z_1-z_2)} \right] - k \sin \alpha_0 z_1 \left[(ik+1) - (ik-1)e^{2\alpha(z_1-z_2)} \right] = 0, (13)$$

$$\sin \alpha_0 z_1 \left[(ik+1) + (ik-1)e^{2\alpha(z_1-z_2)} \right] + k \cos \alpha_0 z_1 \left[(ik+1) - (ik-1)e^{2\alpha(z_1-z_2)} \right] = 0. (14)$$

Оскільки (13-14) – рівняння комплексної змінної, то їх розв'язок буде складатися з дійсної і уявної частин, перша з яких визначає енергію

квазістаціонарних станів електрона в гетеросистемі, а друга даватиме півширину, обернену до часу життя у відповідному стані.

Числові розрахунки проводились для моделі гетеросистеми CdS/HgS/CdS, параметри якої наведені в таблиці 1.

Результати розрахунків зображені на графіках (рис.2-5).

При товщині внутрішнього шару менше $5a_{\text{HgS}}$ існує лише основний енергетичний електронний стан, зі збільшенням цієї товщини починають з'являтися вищі стани з одночасним пониженням енергії (рис.2). Тобто має місце відомий ефект втягування рівнів при збільшенні ширини потенціальної ями.

Таблиця 1.

Матеріал	μ_e, m_0	E_e, meV	$a, \text{\AA}$
CdS	0,2	1350	5,818
HgS	0,036	0	5,851

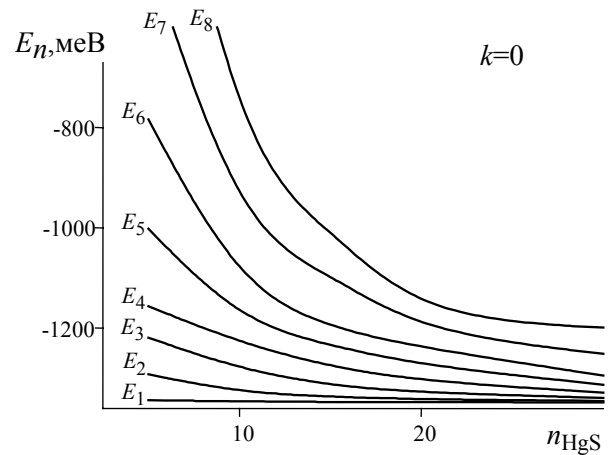


Рис.2. Графік залежності енергії електрона від товщини внутрішнього шару гетеросистеми при $k_{\parallel}=0$. (E_1 – основний стан; E_2 - E_8 – енергії збуджених квазістаціонарних станів).

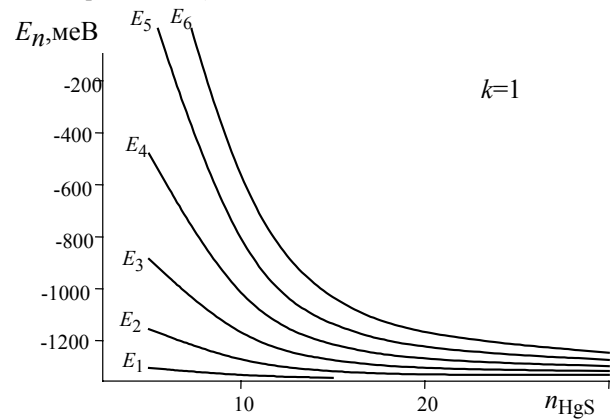


Рис.3. Залежність енергії електрона від товщини внутрішнього шару гетеросистеми при $k_{\parallel}=\pi/a$.

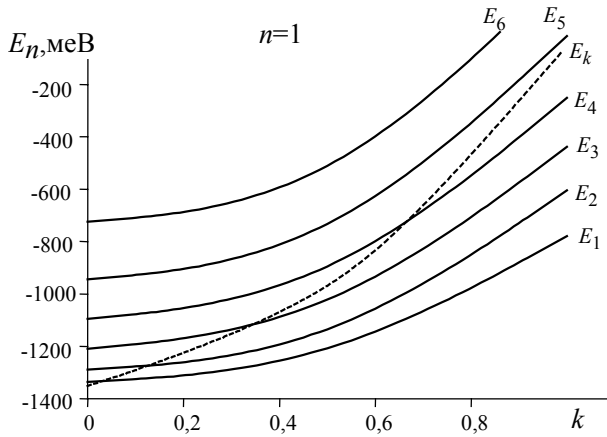


Рис.4. Залежність енергії електрона від квазіімпульсу k_{\parallel} при ширині внутрішнього шару $10a_{\text{HgS}}$ (Пунктиром на графіку показана квадратична залежність енергії електрона від величини квазіімпульсу – для порівняння).

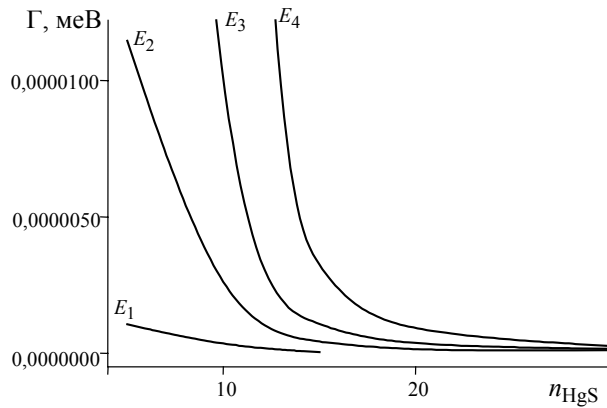


Рис.5. Залежність ширини енергетичного рівня від товщини внутрішнього шару.

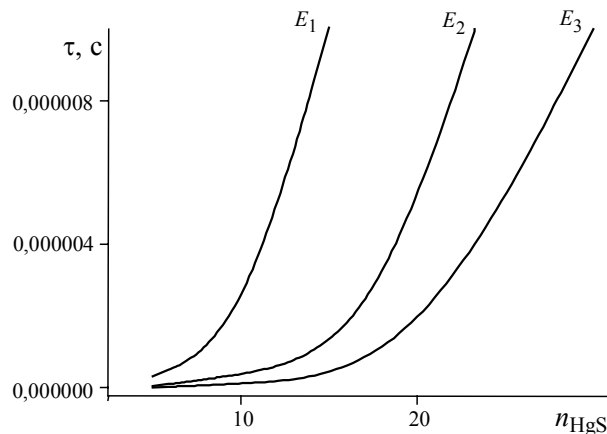


Рис.6. Залежність часу життя електрона на енергетичному рівні від товщини внутрішнього шару.

Така сама залежність енергії електрона від товщини внутрішнього шару гетеросистеми отримана і при відмінних від нуля значеннях k_{\parallel} . Однак

зауважимо, що збільшення величини квазіімпульсу k_{\parallel} призводить до витіснення рівнів. Це пояснюється пониженням ефективної енергії потенціального бар'єра. Як ілюстрація сказаного на рис.3 наведено графік залежності енергій електронних рівнів від товщини внутрішнього шару гетеросистеми при $k_{\parallel}=\pi/a$. Наприклад, при товщині внутрішнього шару $10a_{\text{HgS}}$ існує шість можливих квазістаціонарних електронних станів, тоді як при $k_{\parallel}=0$ їх існувало вісім (рис.2). Отже, збільшення енергії руху в площині, паралельній границі розділу середовищ, істотно впливає і на рух перпендикулярно до цієї площини.

Як і слід було очікувати, має місце і зворотний зв'язок: можливість електрона тунелювати в суміжну область, де його ефективна маса інша, призводить до того, що залежність енергії електрона від величини квазіімпульсу відмінна від квадратичної, хоча рух електрона в площині, паралельній до границі розділення середовищ, – вільний. Залежність величини енергії електрона від двовимірного квазіімпульсу k_{\parallel} при товщині внутрішнього шару, що дорівнює $10a_{\text{HgS}}$ наведена на рис.4.

На рис.5,6 зображено залежність ширини енергетичного рівня і часу життя електрона на енергетичному рівні від товщини внутрішнього шару відповідно.

Важливою особливістю даного спектра є те, що час життя квазістаціонарного електронного стану у відкритій гетеросистемі дуже сильно зростає при збільшенні ширини внутрішньої плівки та конкретному значенні поздовжнього квазіімпульсу. Протилежну картину маємо за умови збільшення квазіімпульсу при конкретній товщині. Фізично це зрозуміло і пояснюється тим, що збільшення ширини внутрішнього шару і зменшення величини k_{\parallel} призводять до збільшення "ефективної висоти" потенціального бар'єра, яке відображається на зростанні часу життя.

Проведені розрахунки і аналіз результатів дозволяють зробити наступні висновки:

1. Кількість електронних зон відкритої плоскої складної наногетероструктури визначається геометричними розмірами гетеросистеми та енергетичними характеристиками її складових.
2. Зі збільшенням ширини внутрішнього шару відбувається відомий ефект втягування енергетичних рівнів: існуючі енергетичні електронні зони понижують свою енергію і з'являються нові зони.

3. Залежність енергії електрона від двовимірного квазіімпульсу відрізняється від квадратичної, що пов'язана з ростом "ефективної" енергії, в полі якої знаходиться електрон. Збільшення енергії електрона, пов'язаної з рухом паралельно до границь розділення середовищ, приводить до витискання енергетичних рівнів.
4. Зі збільшенням ширини внутрішнього шару час життя електронів на тому самому енергетичному рівні різко зростає.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Schooss D., A. Mews, A. Eychmuller, H. Weller. Quantum dot quantum well CdS/HgS/CdS: theory and experiment // Phys. Rev. B - 1994. - II. - **49**, №24. - P.17072-17078.
2. Mews A., A.V. Kadavanich, U. Banin, A.P. Alivisatos Structural and spectroscopic investigations of CdS/HgS/CdS quantum-dot quantum wells // Phys. Rev. B - 1996. - II. - **53**, №20. - P.13242-13245.
3. Ткач М.В., Головацький В.А., Войцехівська О.М., Міхальова М.Я., Фартушинський Р.Б. Спектр електронів і дірок у сферичних наноструктурах // Журнал фіз. досліджень, 2000. - **4**, №3. - С.342-349.
4. Бойчук В.І., Кубай Р.Ю., Білинський І.В. Вплив сил зображень на енергетичний спектр електрона в складному сферичному мікрокристалі CdS/HgS/H₂O // Журнал фізичних досліджень. - 1999. - **3**, №2. - С.187-191.
5. Ткач Н.В., Головацький В.А. Квазистационарные состояния электронов и дырок в открытой сложной цилиндрической квантовой проволоке // ФТТ - 2001. - **43**, №2. - С.350-356.