

ВЛАСТИВОСТІ СПЕКТРА СФЕРИЧНО-СИМЕТРИЧНИХ СТАНІВ ЕЛЕКТРОНІВ У ЗАКРИТИХ СКТ З ДВОМА ПОТЕНЦІАЛЬНИМИ ЯМАМИ, ЩО ПЕРЕХОДИТЬ У ВІДКРИТУ СКТ

Побудована теорія і досліджено еволюцію спектра сферично-симетричних станів електрона двоямної СКТ при зміні розмірів (Δ_2) зовнішньої ями від нуля до безмежності. Показано, що при $\Delta_2 \rightarrow 0$ спектр збігається зі спектром одноямної закритої СКТ, а при $\Delta_2 \rightarrow \infty$ він переходить у спектр простої відкритої СКТ через згасання квантових станів.

The theory of electron spectrum in spherically symmetric states is established and the evolution of the spectrum when the size of the external well (Δ_2) varies from zero to infinity is researched. It is shown that at $\Delta_2 \rightarrow 0$ the spectrum is equal to the spectrum of one-well closed SQD and at $\Delta_2 \rightarrow \infty$ it is transformed into the spectrum of single opened SQD with decaying quantum states.

Вступ

Теорія спектрів і хвильових функцій (електронів і дірок) у простих і багатоямних сферичних квантових точках (СКТ) побудована як для закритих [1, 2], так і для відкритих наногетеросистем [2-4]. Що ж до теорії екситонів чи взаємодії електронів, дірок та екситонів з фононами в закритих СКТ, то вона знаходиться на стадії розвитку й будується на базі різних моделей фононної підсистеми (здебільшого це модель діелектричного континууму) для закритих систем [2,5,6].

Теорія спектрів електронів і дірок у відкритих СКТ була розвинута у працях [3,4] на основі S -матриці розсіювання. Вона добре описує властивості квазістаціонарних енергетичних станів і часів життя електронів та дірок у цих системах. Внаслідок того, що хвильові функції в цій теорії нормовані не на одиницю, а на δ -функцію, то це унеможливило перехід до зображення чисел заповнення за електронними (дірковими) змінними. Тому стає неможливою побудова теорії перенормування електронного й діркового спектрів взаємодією цих квазічастинок із фононами традиційними методами квантової теорії поля.

Вихід із цієї складної ситуації вбачається в заміщенні відкритої одноямної і однобар'єрної СКТ закритою двоямною СКТ з дуже великою товщиною зовнішньої ями. Однак тоді виникає принципове запитання: при яких товщинах зовнішньої ями закритої СКТ електронний спектр і

хвильові функції в ній можна вважати близькими до відповідної відкритої системи? При такому підході виникає ще одне важливе запитання, на яке, наскільки нам відомо, до цього часу у літературі не було відповіді: чому в простій відкритій наносистемі існують квазістаціонарні стани, в яких електрон має скінчений час життя, тоді як у закритій двоямній наносистемі при довільних ширинях зовнішньої ями спектр – стаціонарний і, на перший погляд, він ніби не має можливості перейти у квазістаціонарний при $\Delta_2 \rightarrow \infty$? Однак, як буде далі показано, причина такої можливості існує – це резонансне зближення ("антикросінг") енергетичних рівнів наносистеми з двома ямами при розширенні розміру зовнішньої ями Δ_2 до безмежності.

Гамільтоніан наносистеми. Спектр і хвильові функції

Будемо вивчати спектр і хвильові функції електрона в закритій СКТ з двома потенціальними ямами та одним бар'єром (рис. 1б). Геометричні параметри: радіус внутрішньої ями r_0 , товщина шару-бар'єру Δ_1 і товщина зовнішньої ями Δ_2 вказані на рис. 1б. З рис. 1 видно, що при $\Delta_2 \rightarrow 0$ тришарова наносистема збігається з простою закритою СКТ (рис. 1а), а при $\Delta_2 \rightarrow \infty$ вона переходить у просту відкритую двоямну СКТ (рис. 1в). На рис. 1а-в схематично наведені потенціальні енергії електрона у відповідних наногетеросистемах.

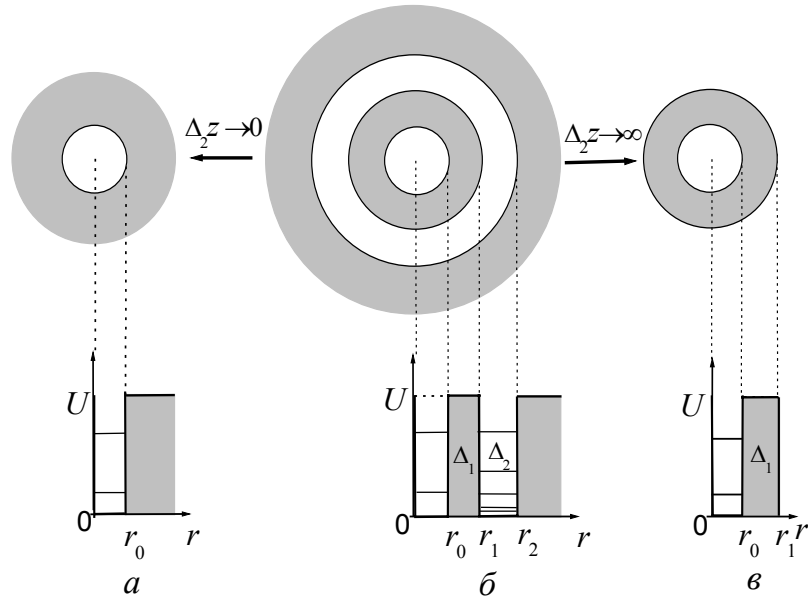


Рис. 1. Геометричні та енергетичні схеми простої закритої (а), двоїмної закритої (б) та простої відкритої (в) СКТ

Для аналізу особливостей еволюції спектра і хвильових функцій електрона в залежності від зміни товщини зовнішньої ями Δ_2 отримаємо їх згідно із загальною теорією [2] шляхом розв'язку стаціонарного рівняння Шредінгера

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

$$m(r) = \begin{cases} m_0, & r < r_0, r_1 < r < r_2 \\ m_1, & r_0 \leq r \leq r_1, r_2 \leq r < \infty \end{cases}, \quad (2)$$

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r < r_0, r_1 < r < r_2 \\ U, & r_0 \leq r \leq r_1, r_2 \leq r < \infty \end{cases}$$

$$\Psi_{\ell m}(\vec{r}) = R_\ell(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad \ell=0,1,2, m=0,\pm 1,\pm 2. \quad (3)$$

$R_\ell^i(r)$ знаходиться як лінійна комбінація функцій Бесселя

$$R_\ell^i(K_i r) = A_\ell^i J_\ell(K_i r) + B_\ell^i N_\ell(K_i r), \quad (4)$$

де
$$J_\ell(K_i r) = \begin{cases} j_\ell(k_i r) \\ h_\ell^+(i\chi_i r) \end{cases}$$

$$N_\ell(K_i r) = \begin{cases} n_\ell(k_i r) & U_i \geq E \\ h_\ell^-(i\chi_i r) & U_i \leq E \end{cases}, \quad (5)$$

$$K_i^2 = \frac{2m_i}{\hbar} (E - U_i) = \begin{cases} k_i^2, & i=0,2 \\ -\chi_i^2, & i=1 \end{cases}. \quad (6)$$

З використанням граничних умов неперервності хвильових функцій та потоків їх густин на всіх межах системи

$$\left. \begin{aligned} R_\ell^i(r)|_{r=r_i} &= R_\ell^{i+1}(r)|_{r=r_i} \\ \frac{1}{m_i} \frac{dR_\ell^i(r)}{dr} \Big|_{r=r_i} &= \frac{1}{m_{i+1}} \frac{dR_\ell^{i+1}(r)}{dr} \Big|_{r=r_i} \end{aligned} \right\}, \quad (7)$$

разом із умовою нормування

$$\int_0^\infty |R_\ell(r)|^2 r^2 dr = 1 \quad (8)$$

однозначно знаходяться всі коефіцієнти A_ℓ^i, B_ℓ^i , а отже, і весь повний набір хвильових функцій та енергетичний спектр ($E_{n\ell}$) електрона. Через громіздкість аналітичних виразів вони не наводяться в явному вигляді.

Спектр і хвильові функції електрона в простій відкритій наносистемі принципово неможливо отримати в аналітичному вигляді граничним переходом із двоїмної закритої системи при $\Delta_2 \rightarrow \infty$. Для цього типу системи при розв'язанні рівняння Шредінгера (1) використовується метод S-матриці [2]. У позначеннях складових підсистем, що відповідають рис. 1в, хвильові функції сферично симетричних станів ($\ell=0$) мають вигляд

$$R_{n0}(r) = \begin{cases} R_0^{(0)}(r) = kA_0^{(0)} [h_0^-(kr) + h_0^+(kr)], \\ R_0^{(1)}(r) = i\chi A_0^{(1)} [h_0^-(i\chi r) - S_0^{(1)} h_0^+(i\chi r)], \\ R_0^{(2)}(r) = kA_0^{(2)} [h_0^-(kr) - S_0(k) h_0^+(kr)]. \end{cases} \quad (9)$$

Коефіцієнт $A_0^{(2)} = 1/\sqrt{2\pi}$ визначається з умови нормування

$$\int_0^{\infty} R_{0k}^*(r) R_{0k'}(r) r^2 dr = \delta(k - k'), \quad (10)$$

а решта невідомих коефіцієнтів A_0^0, A_0^1, S_0^1 та S_0 -матриця розсіяння однозначно визначаються з граничних умов (7).

Фізичні причини згасання квазістаціонарних станів відкритої СКТ

Розрахунки виконано для закритої двоямної СКТ HgS/CdS/HgS/CdS із параметрами: $m_{\text{HgS}} = 0,036, m_{\text{CdS}} = 0,2, U = 1350$ меВ, $a_{\text{HgS}} = 5,851 \text{ \AA}, a_{\text{CdS}} = 5,818 \text{ \AA}$, які добре узгоджуються з моделлю прямокутного потенціалу.

Еволюція $W_{n0} = \int_0^{\eta+\Delta_1} \rho_{n0}(r) dr$ ймовірностей

перебування електрона у внутрішніх ямі і бар'єрі зі зміною товщини зовнішньої ями зображена на рис. 2. Він одночасно ілюструє процес формування півширин Γ_{n0} смуг квазістаціонарних станів у відкритій СКТ, а отже, і виникнення поняття часу життя електрона $\tau_{n0} = \hbar/\Gamma_{n0}$ у відповідному квазістаціонарному стані.

Як видно з рис. 2а, якщо зовнішня яма ще достатньо вузька ($\Delta_2 = 200 a_{\text{HgS}}$), то ймовірності \tilde{W}_{10} і \tilde{W}_{20} більше ніж у двічі переважають відповідні ймовірності W_{n0} на тих рівнях, які розташовані з обох боків від них. Ймовірність \tilde{W}_{30} переважає ймовірність W_{n0} сусіднього стану з боку більших енергій також більше ніж у двічі, а з боку менших енергій – менше ніж у двічі. Остання обставина, тобто великі значення ймовірностей двох сусідніх станів, зумовлена тим, що ці стани при $\Delta_2 = 200 a_{\text{HgS}}$ якраз утворюють антикросінг. Отже, при $\Delta_2 = 200 a_{\text{HgS}}$ ще не виникли достатні умови для появи ширини квазістаціонарної смуги.

З рис. 2б видно, що при достатньо великій товщині зовнішньої ями $\Delta_2 = 1000 a_{\text{HgS}}$ в області найнижчого квазістаціонарного стану \tilde{E}_{10} ще не виникає півширина смуги, але навколо другого і третього квазістаціонарних станів \tilde{E}_{20} і \tilde{E}_{30} вже з'являються стани, що задовольняють умові виникнення відповідних півширин смуг $\tilde{\Gamma}_{20}, \tilde{\Gamma}_{30}$. При товщині $\Delta_2 = 10000 a_{\text{HgS}}$ (рис. 2в) уже всі три квазістаціонарні смуги мають свої півширини.

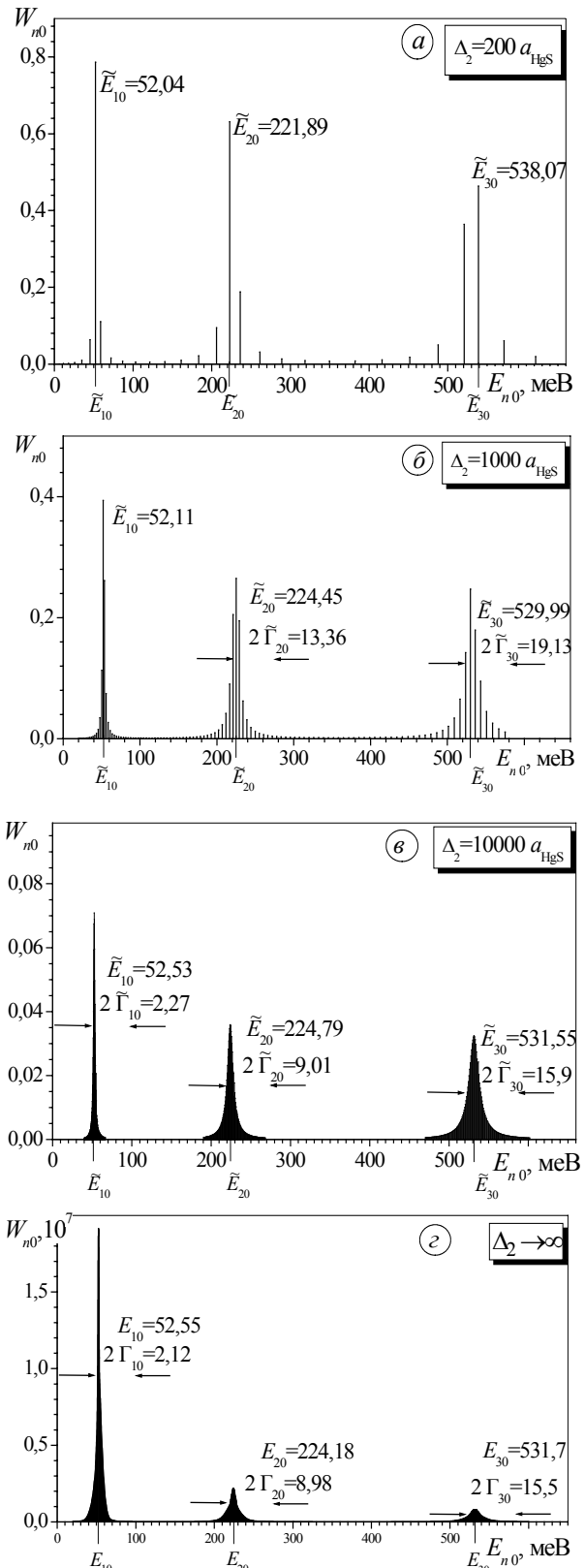


Рис. 2. Еволюція ймовірностей перебування електрона у двох внутрішніх шарах закритої СКТ в околах резонансних енергій (а, б, в) та залежність ймовірностей W_{n0} від енергії в простій відкритій СКТ (г)

Порівнюючи рис. 2в і Рис. 2г між собою, отримуємо, що положення резонансних рівнів енергій і ширин смуг закритої двоямною (рис. 2в) і відкритої одноямною (рис. 2б) СТК практично однакові, хоча нормування в них відрізняється.

Рис. 2 добре ілюструє процес формування смуг квазістаціонарних станів з їх основними характеристиками – резонансними енергіями E_{n0}^e та півширинами Γ_{n0} при збільшенні розмірів зовнішньої ями закритої СКТ.

З рис. 2 видно, як зі збільшенням Δ_2 відбувається перерозподіл ймовірностей знаходження електрона в обох внутрішніх шарах СКТ між різними станами. При малих значеннях Δ_2 (рис. 2а) ймовірності в резонансних станах великі, а в інших – відносно малі. Зі збільшенням Δ_2 (рис. 2б) ймовірності у резонансних станах зменшуються, але відносно зростають у навколишніх станах. Оскільки при збільшенні Δ_2 відстань між енергетичними рівнями зменшується, то при дуже великих значеннях Δ_2 (рис. 2в) в околах резонансних енергій виникають лоренцевоподібні піки з півширинами $\tilde{\Gamma}_{n0}$, які при $\Delta_2 \rightarrow \infty$ переходять у квазістаціонарні смуги з півширинами Γ_{n0} (рис. 2г).

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Ткач Н.В., Головацкий В.А., Войцеховская О.Н., Михалёва М.Я. Перенормировка электронного спектра ограниченными и интерфейсными фононами в сферической наногетеросистеме β -HgS/CdS // ФТТ. – 2001. – 43, №7. – С.1315-1321.
2. Ткач М.В. Квазічастинки у наногетеросистемах. Квантові точки та дроти. – Чернівці: Рута, 2003.
3. Tkach M.V., Holovats'ky V.A., Berezovs'ky Y.M., Makhanets' O.M., Val' O.D. Electron and exciton spectra in opened nanoheterosystems // Proceedings International Conference on Advanced Optoelectronics and Lasers, 2003. – V.1. – P8-13.
4. Ткач М.В., Березовський Я.М. Квазістаціонарні стани з $l \neq 0$ у відкритих сферичних квантових точках // УФЖ. – 2003. – 48, №1. – С.75-81.
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. Ткач Н.В., Головацкий В.А. Квазістаціонарні стани електронів і дірок в відкритій складній циліндричній квантовій проволочці // ФТТ. – 2001. – 43, №2. – С.350-356.