

ВЛАСТИВОСТІ ЕНЕРГЕТИЧНОГО СПЕКТРА ЕЛЕКТРОНІВ В ЕЛІПТИЧНОМУ КВАНТОВОМУ ДРОТІ

У наближенні ефективної маси досліджено спектр електрона в еліптичному квантовому дроті GaAs. Отримано точний енергетичний спектр електрона у випадку безмежного потенціального бар'єра для електрона на межі квантового дроту та наближені розв'язки рівняння Шредінгера при скінченній висоті потенціального бар'єра на межі поділу середовищ GaAs/Al_xGa_{1-x}As.

The electron spectrum in elliptic quantum wire (EQW) GaAs is studies within the effective mass approximation. The exact electron energy spectrum is obtained for the infinite potential barrier for the electron at the interface of quantum wire and the approximated solutions of Schrödinger equation for the finite height of the potential barrier at the media interface GaAs/Al_xGa_{1-x}As as well.

Вступ

Різноманітні наногетеросистеми у вигляді квантових точок, квантових дротів та їх комбінацій є предметом інтенсивних теоретичних та експериментальних досліджень останніх років. На даний момент існує багато методів вирощування напівпровідникових наносистем, завдяки яким отримуються квантові точки та квантові дроти різної геометричної форми. При теоретичних дослідженнях енергетичного спектра квазічастинок у наносистемах виникають проблеми розв'язання рівняння Шредінгера для складної форми потенціалу. У найпростіших випадках для сферичних квантових точок та циліндричних квантових дротів із непроникними стінками вдається отримати точний енергетичний спектр та хвильові функції квазічастинок. Такі задачі розв'язувались для різних напівпровідникових наноструктур [1,2]. На основі аналітичних виразів для хвильових функцій квазічастинок досліджено взаємодію квазічастинок між собою та розраховано перенормування енергетичного спектра внаслідок цієї взаємодії [3]. Ще однією квантово-механічною задачею, яка допускає знаходження точних розв'язків, є задача розрахунку енергетичного спектра квазічастинок в еліптичному квантовому дроті (ЕКД). Ця задача цікава ще й тому, що реальні напівпровідникові циліндричні наногетеросистеми внаслідок дії поперечних напруг або поперечного тиску мають еліптичну форму. Дослідження сферичних квантових точок та циліндричних квантових дротів, у тому числі й багатопарових, ведеться вже довгий час, а анало-

гічні дослідження для ЕКД майже відсутні [4].

Метою даної роботи є теоретичне дослідження парних і непарних станів електронів у напівпровідникових еліптичних квантових дротах GaAs/діелектрик та GaAs/Al_xGa_{1-x}As.

Гамільтоніан і хвильові функції електрона в ЕКД

Розглянемо еліптичний квантовий дріт GaAs (середовище 0), поміщений у напівпровідникову чи діелектричну матрицю (середовище 1). Систему координат виберемо так, що вісь Oz направлена вздовж дроту. Потенціальна енергія і ефективна маса електрона в декартових координатах матиме такий вигляд:

$$\mu(x, y) = \begin{cases} \mu_0, & x^2/a^2 + y^2/b^2 \leq 1, \\ \mu_1, & x^2/a^2 + y^2/b^2 > 1, \end{cases} \quad (1)$$

$$U(x, y) = \begin{cases} 0, & x^2/a^2 + y^2/b^2 \leq 1, \\ V, & x^2/a^2 + y^2/b^2 > 1, \end{cases} \quad (2)$$

де a і b – півосі еліпса.

У напрямку вздовж квантового дроту електрон здійснює вільний рух. Внаслідок незначного проникнення квазічастинки в середовище 1 частка енергії, що зумовлена поздовжнім рухом, має вигляд $E_z = \hbar^2 k_z^2 / 2\mu^*$, де μ^* – усереднена ефективна маса, яка у випадку безмежних потенціальних бар'єрів збігається з μ_0 .

Енергія, зумовлена поперечним рухом, знаходиться з розв'язку рівняння Шредінгера, яке в загальному випадку координатно залежної маси має вигляд

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

Підставляючи (1) і (2) в рівняння (3), отримаємо для кожного середовища такі рівняння:

$$\bar{\nabla}^2 \Psi^{(i)}(x,y) + k_i^2 \Psi^{(i)}(x,y) = 0, \quad (i=0, 1) \quad (4)$$

де $k_i^2 = \frac{2\mu_i}{\hbar^2} (E - V_i)$, $V_0=0$. Враховуючи те, що дана наногетеросистема володіє еліптичною симетрією, то рівняння (4) зручно розв'язувати в еліптичних координатах (ξ, η, z) , які мають зв'язок з декартовими координатами за такими співвідношеннями:

$$\begin{aligned} x &= f \cosh \xi \cos \eta & 0 \leq \xi < \infty, \\ y &= f \sinh \xi \sin \eta, & 0 \leq \eta < 2\pi, \\ z &= z, & -\infty < z < +\infty, \end{aligned} \quad (5)$$

де $f = \sqrt{a^2 - b^2}$ – фокусна відстань, ξ – виконує роль радіальної координати, а η – кутової.

Перейдемо в рівнянні (3) від декартових координат до еліптичних. Тоді рівняння Шредінгера (4) приймуть вигляд:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \frac{f^2 k_i^2}{2} (\cosh 2\xi - \cos 2\eta) \right] \times \Psi^{(i)}(\xi, \eta) = 0, \quad (i=0, 1). \quad (6)$$

Як показано в роботі [5] змінні у рівнянні (6) у загальному випадку розділити неможливо і тому хвильову функцію $\Psi^{(i)}(\xi, \eta)$ треба записувати у вигляді:

$$\Psi^{(i)}(\xi, \eta) = \sum_m R_m^{(i)}(\xi) \theta_m^{(i)}(\eta), \quad (7)$$

де $R_m^{(i)}(\xi)$ – радіальна і $\theta_m^{(i)}(\eta)$ – кутова частини, які задовольняють рівнянням Мат'є:

$$\partial^2 \theta_m^{(i)}(\eta) / \partial \eta^2 + (c - 2q_i \cos 2\eta) \theta_m^{(i)}(\eta) = 0, \quad (8)$$

$$\partial^2 R_m^{(i)}(\xi) / \partial \xi^2 - (c - 2q_i \cosh 2\xi) R_m^{(i)}(\xi) = 0, \quad (9)$$

де $q_i = f^2 k_i^2 / 4$, c – константа розділення.

Лише у випадку непроникних стінок на межі квантового дроту хвильова функція допускає розділення змінних і такі квантові стани квазі-частинки характеризується певним значенням квантового числа m –

$$\Psi_m(\xi, \eta) = R_m(\xi) \theta_m(\eta). \quad (10)$$

Рівняння (8) і (9) є характеристичними для функції Мат'є. Розв'язками рівняння (8) є функції

Мат'є першого та другого роду. Оскільки умовам періодичності можуть задовольняти лише парна $ce_m(q, \eta)$ та непарна $se_m(q, \eta)$ функції Мат'є першого роду, то кутова частина хвильової функції матиме вигляд:

$$\theta_m(q, \eta) = \begin{cases} ce_m(q, \eta), \\ se_m(q, \eta). \end{cases} \quad (11)$$

Розв'язками радіального рівняння (9) є лінійна комбінація парних (e) та непарних (o) модифікованих функцій Мат'є першого і другого роду:

$$R_m^e(q, \xi) = \begin{cases} A_m^e J_e(q, \xi) + B_m^e N_e(q, \xi), & q > 0 \\ A_m^e I_e(q, \xi) + B_m^e K_o(q, \xi), & q < 0 \end{cases} \quad (12)$$

$$R_m^o(q, \xi) = \begin{cases} A_m^o J_o(q, \xi) + B_m^o N_o(q, \xi), & q > 0 \\ A_m^o I_o(q, \xi) + B_m^o K_o(q, \xi), & q < 0 \end{cases} \quad (13)$$

де $A_m^e, A_m^o, B_m^e, B_m^o$ – коефіцієнти, що визначаються граничними умовами та умовою нормування.

Модифіковані функції Мат'є, що входять в радіальну хвильову функцію мають складну залежність від коефіцієнта розділення c , який визначається із умови періодичності кутової частини хвильової функції (11) і збігаються з відповідними функціями Бесселя у граничному випадку, коли еліптичні координати прямують до циліндричних.

Енергетичний спектр квазічастинки знаходимо, використовуючи граничні умови для хвильової функції.

У випадку непроникних стінок для еліптичного квантового дроту парна та непарна хвильові функції на поверхні еліптичного циліндра $\xi=\xi_0$ дорівнюють нулю, а їх радіальні частини міститимуть по аналогії з циліндричним дротом лише функції $J_{e_m}(q, \xi)$ і $J_{o_m}(q, \xi)$ (коефіцієнти $B_m^e = B_m^o = 0$). Отже, енергії парних та непарних станів електрона з певним значенням квантового числа m визначаються з рівнянь:

$$J_{e_m}(q, \xi) \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad (14a)$$

$$J_{o_m}(q, \xi) \Big|_{\xi=\xi_0} = 0. \quad (14b)$$

Значення $q_{nm}^{e(o)} = f^2 \frac{\mu_0}{2\hbar^2} E_{nm}^{e(o)}$, які задовольняють

рівняння (14) визначають безмежний набір дискретних енергетичних рівнів квазічастинки $E_{nm}^{e(o)}$, де $n=0, 1, 2, \dots$ – головне квантове число,

яке нумерує порядковий номер відповідного кореня.

Отже, у випадку непроникних меж задача знаходження енергетичного спектра квазічастинок в ЕКД має точні розв'язки. Модель потенціалу з безмежними стінками можна використовувати у випадку, коли енергія досліджуваної частинки значно менша за висоту потенціального бар'єра на межі поділу середовищ, що часто реалізується для наносистем, поміщених в діелектричне середовище.

Складніша ситуація у випадку, коли напівпровідниковий ЕКД, поміщений у напівпровідникову матрицю. Тоді висота потенціального бар'єра V порівняна з величинами найнижчих енергетичних рівнів наносистеми. Застосувати звичайні умови зшивки хвильових функцій (7) та густин потоків ймовірності, побудованих на основі таких хвильових функцій на еліптичній межі, яка допускає можливість проникнення квазічастинок, дуже складно. Квантові стани в такій наносистемі не характеризуються певним значенням m , а є комбінацією станів із різними значеннями цього квантового числа. Проте, як показують результати дослідження еліптичних квантових дротів зі скінченною висотою потенціального бар'єра і невеликим ексцентриситетом $\varepsilon=f/a$, достатньо зберігати один доданок у розкладі (7).

З умови неперервності хвильової функції та густини потоку ймовірності на еліптичній межі поділу середовищ отримуються дисперсійні рівняння для знаходження енергетичного спектра електрона в еліптичному квантовому дроті

$$\frac{1}{\mu_0} \left. \frac{J e'_m(q_0, \xi)}{J e_m(q_0, \xi)} \right|_{\xi=\xi_0} = \frac{1}{\mu_1} \left. \frac{K e'_m(q_1, \xi)}{K e_m(q_1, \xi)} \right|_{\xi=\xi_0}, \quad (15)$$

$$\frac{1}{\mu_0} \left. \frac{J o'_m(q_0, \xi)}{J o_m(q_0, \xi)} \right|_{\xi=\xi_0} = \frac{1}{\mu_1} \left. \frac{K o'_m(q_1, \xi)}{K o_m(q_1, \xi)} \right|_{\xi=\xi_0}, \quad (16)$$

де $q_1 = \frac{f^2 \mu_1}{2 \hbar^2} (E - V) < 0$.

Аналіз та обговорення результатів числових розрахунків

На рис. 1а наведено результати розрахунку енергій поперечного руху електрона у ЕКД GaAs з непроникними стінками ($k_z=0$) в залежності від співвідношення півосей еліпса a/b при його постійній площі (радіус рівновеликого з еліпсом кола $R_0=10$ нм). Ефективна маса електрона $\mu_0=0,067m_e$, m_e – маса вільного електрона. Парні

стани зображено суцільними лініями, непарні – штриховими. Для порівняння на рис. 1б наведено розрахунки енергетичного спектра електрона у квантовому дроті прямокутного перерізу (рівновеликому з еліптичним) за формулою

$$E_{m n_2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 \mu_0} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} \right), \quad (17)$$

де a, b – поперечні розміри квантового дроту.

З рис. 1а видно, що парні та непарні стани утворюють серії рівнів, причому енергії парних станів розташовані нижче за енергетичною шкалою, ніж відповідні енергії непарних станів. Якісно подібний спектр спостерігається у квантовому дроті прямокутного перерізу (рис. 1б). Збільшення співвідношення a/b при постійній площі поперечного перерізу дроту приводить до створення квазінеперервних зон енергії як в ЕКД, так і у квантовому дроті прямокутного перерізу. У граничному випадку, коли еліпс вироджується в коло ($a/b=1$), енергії парних та непарних станів збігаються.

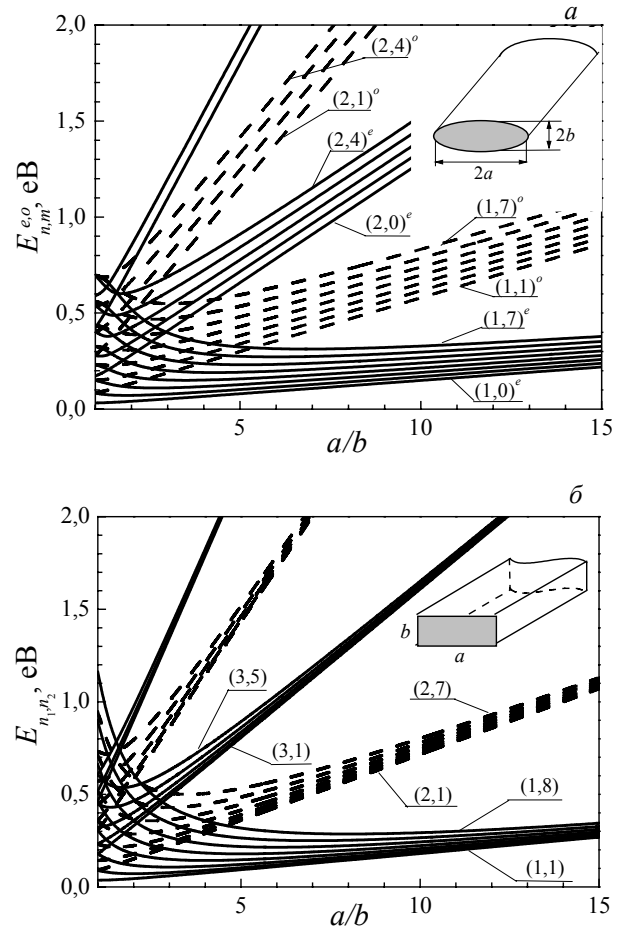


Рис. 1. Залежність енергетичного спектра електрона в еліптичному (а) та в прямокутному (б) квантових дротах GaAs від співвідношення a/b

На рис. 2 наведено результати розрахунку залежності електронного енергетичного спектра в ЕКД GaAs/Al_xGa_{1-x}As від співвідношення a/b (суцільні лінії).

Обчислення енергії E_{nm} виконувалося за (15), (16) для електрона в ЕКД GaAs/Al_xGa_{1-x}As з такими параметрами напівпровідникових кристалів: $x=0,4$, $\mu_0=0,067m_e$ і $\mu_1=0,1\mu_e$ – ефективні маси електрона в кристалах GaAs та Al_xGa_{1-x}As, $V=0,387$ eV – висота потенціального бар'єра для електрона. Для порівняння пунктирними лініями наведено енергетичний спектр в ЕКД GaAs з непроникними стінками. З рис. 2 видно наступне. Енергії всіх парних та непарних станів електрона в безмежно глибокій потенціальній ямі (БГПЯ) при співвідношенні $1 < a/b < 2$ знаходяться нижче за відповідні енергії в ЕКД зі скінченним потенціальним бар'єром на межі поділу середовищ. Але з ростом величини a/b ситуація змінюється, оскільки енергії рівнів у БГПЯ зростають швидше за відповідні їм енергії в скінченній потенціальній ямі.

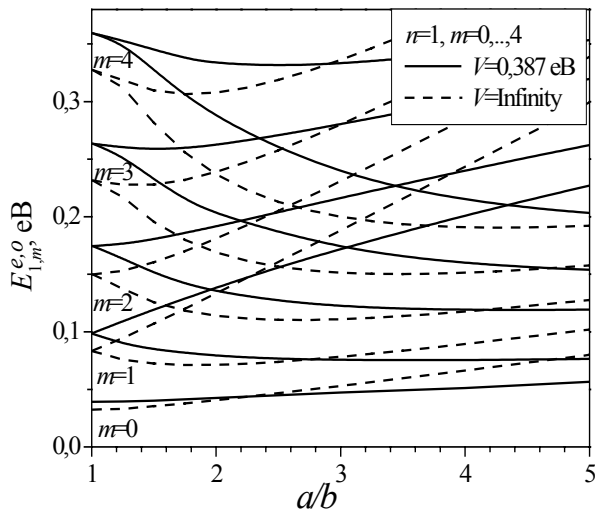


Рис. 2. Залежність енергетичного спектра електрона в ЕКД GaAs/Al_xGa_{1-x}As від співвідношення a/b (суцільні лінії). Пунктирні лінії – енергетичний спектр в еліптичній потенціальній ямі з безмежними стінками

Висновок

У випадку непроникних стінок отримується точний енергетичний спектр квазічастинки в ЕКД та хвильові функції, які можуть бути використані для побудови наближених розв'язків більш складних задач. Енергетичний спектр в ЕКД навіть при невеликому ексцентриситеті суттєво відрізняється від спектра циліндричних квантових дрітків.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Tkach M.B., Головацький В.А., Войцехівська О.М., Міхальова М.Я. Фононий спектр у сферичній наногетеросистемі CdS/HgS/ZnS/H₂O // Журнал фізичних досліджень. – 1999. – 3, №1. – С.76-80.
2. Tkach M., Holovatsky V., Voitsekhivska O. Electron and hole quasistationary states in opened cylindrical quantum wire // Physica E. – 2001. – 11. – P.17-26.
3. Tkach M., Holovatsky V., Voitsekhivska O., Fartushynsky R. Electron-phonon interaction in semiconductor spherical quantum dot embedded in a semiconductor medium (HgS/CdS) // Phys. Stat. Sol. – 2001. – 225, No.2. – P.331-342.
4. Van den Broek M., Peeters F.M. Confined states in two-dimensional flat elliptic quantum dots and elliptic quantum wires // Physica E. – 2001. – 11. – P.345-355.
5. Lew Yan Voon L.C., Galeriu C., Willatzen M. Comment on: Confined states in two-dimensional flat elliptic quantum dots and elliptic quantum wires // Physica E. – 2003. – 18. – P.547-549.