

Квазистационарные состояния электронов и дырок в открытой сложной цилиндрической квантовой проволоке

© Н.В. Ткач, В.А. Головацкий

Черновицкий государственный университет,
58012 Черновцы, Украина

(Поступила в Редакцию 27 марта 2000 г.
В окончательной редакции 13 июня 2000 г.)

В приближении эффективной массы, используя теорию S -матрицы, численными методами получены энергии квазистационарных состояний электронов и дырок в открытой сложной цилиндрической квантовой проволоке. Конкретный расчет выполнялся на примере системы $\text{HgS}/\text{CdS}/\text{HgS}$. Исследованы полюса S -матрицы в комплексной плоскости энергий. Получены зависимости времен жизни квазичастиц в квазистационарных резонансных состояниях от геометрических размеров наносистемы и продольного квазиимпульса. Показано, что в резонансных состояниях времена жизни квазичастиц экспоненциально уменьшаются с увеличением продольного квазиимпульса.

В 90-е годы первые успехи в создании лазеров на полупроводниковых квантовых проволоках и квантовых точках [1,2] привлекли внимание многих исследователей к изучению физических процессов, происходящих в одномерных и нульмерных наносистемах. К настоящему времени в этой области уже имеется значительное число как теоретических, так и экспериментальных работ. Современные технологические методы позволяют создавать упорядоченные массивы квантовых точек и проволок, а также многослойные сферические наногетероструктуры [3,4]. Это стимулировало интерес к теоретическому исследованию спектров и взаимодействия квазичастиц (электронов, дырок, экситонов, фононов) в таких системах. Теория спектров электронов, дырок, экситонов и их взаимодействия с фононами в сферических многослойных наносистемах развита в работах [3,5,6], а в цилиндрических — в работе [7]. При этом в теории предполагалось, что внешняя среда, в которой находится многослойная сферическая наногетероструктура, является максимальным потенциальным барьером по отношению к внутренним слоям и, таким образом, система является закрытой.

Современные технологические возможности (например, метод ионного замещения [3,4]) позволяют создавать наногетеросистемы открытого типа, т.е. такие, у которых потенциальная энергия квазичастицы во внешней среде минимальна, в связи с чем квазичастица может удаляться до бесконечности. В таких системах спектр является квазистационарным, поэтому соответствующие состояния характеризуются определенными конечными временами жизни из-за возможности проникновения квазичастицы через потенциальные барьеры наносистемы.

Интерес к открытым системам обусловлен тем, что они могут служить элементной базой ЭВМ [8].

В работе [9] теоретически исследовался квазистационарный спектр электронов и дырок в открытой сферической наногетеросистеме $\text{HgS}/\text{CdS}/\text{HgS}$. Сферическая симметрия системы позволила модернизировать известный из теории ядер [10] метод S -матрицы на случай

различных масс квазичастицы в разных слоях системы и таким образом исследовать спектр и времена жизни электронов и дырок в квазистационарных состояниях.

Цель настоящей работы — теоретическое исследование резонансных энергий и времен жизни электронов и дырок в квазистационарных состояниях открытой сложной цилиндрической квантовой проволоки (СЦКП), в частности в наносистеме $\text{HgS}/\text{CdS}/\text{HgS}$. Эта задача решается сложнее, чем в случае открытой сложной сферической квантовой точки (ССКТ) [9], так как цилиндрическая наносистема имеет более низкую симметрию, а электрон и дырка имеют квазиимпульс (параллельный аксиальной оси). Это приводит к сложному аналитическому выражению для S -матрицы, из которого резонансные энергии и времена жизни вычисляются лишь численными методами.

1. Гамильтониан и волновые функции электрона и дырки в СЦКП

Исследуются электронный и дырочный спектры открытой цилиндрической наногетероструктуры (сложной цилиндрической квантовой проволоки), которая состоит из ядра HgS (0-яма) и слоя CdS (1-барьер), помещенных в бесконечную среду HgS (2-яма). Схема открытой СЦКП и потенциальные энергии электрона и дырки в ней изображены на рис. 1. Здесь не предполагается исследование поведения электрона и дырки в магнитном поле, поэтому спины обеих квазичастиц учитываться не будут. В приближении эффективных масс и независимых зон легких и тяжелых дырок в конкретно исследуемой далее СЦКП $\text{HgS}/\text{CdS}/\text{HgS}$ теория для электронов и дырок эквивалентна, поэтому без потери общности дальнейшие аналитические выкладки выполняются для электрона. Различие между спектральными свойствами электронов и дырок возникает лишь на этапе числовых расчетов из-за различия эффективных масс квазичастиц и действующих на них потенциальных полей. Соответствующий анализ будет приведен в следующем разделе.

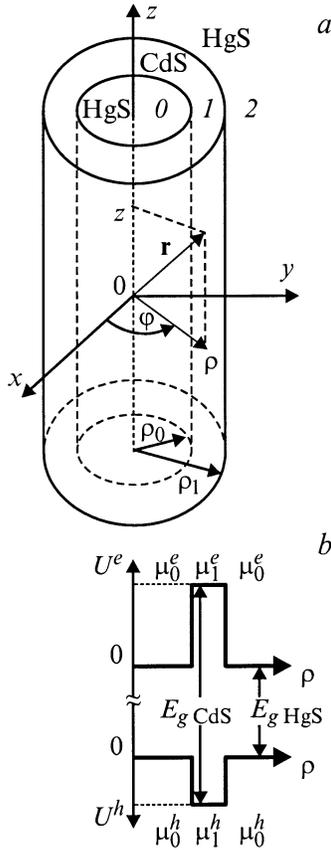


Рис. 1. Геометрическая схема (а) и схема потенциальной энергии электрона и дырки в СЦКП (b).

В цилиндрической системе координат с началом в центре гетероструктуры электрон характеризуется эффективной массой $\mu(\rho)$ и потенциальной энергией $U(\rho)$, которые являются функциями расстояния от аксиальной оси СЦКП, так как в разных средах они имеют разные величины

$$\mu(\rho) = \begin{cases} \mu_0, & \rho < \rho_0, \\ \mu_1, & \rho_0 \leq \rho \leq \rho_1, \\ \mu_0, & \rho > \rho_1 \end{cases}$$

$$U(\rho) = \begin{cases} 0, & \rho < \rho_0, \\ U, & \rho_0 \leq \rho \leq \rho_1. \\ 0, & \rho > \rho_1 \end{cases} \quad (1)$$

В связи с зависимостью эффективной массы от ρ уравнение Шредингера имеет вид [11,12]

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{\mu(\rho)} \nabla + U(\rho) \right) \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}). \quad (2)$$

С учетом аксиальной симметрии его решение ищется в виде

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = \frac{1}{\sqrt{L}} R(\rho) e^{im\varphi} e^{ikz}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (3)$$

где $R(\rho)$ — радиальная волновая функция.

В результате подстановки (3) в (2) получается уравнение для радиальной волновой функции

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\rho}{\mu(\rho)} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{m^2}{\rho^2 \mu(\rho)} - \frac{k^2}{\mu(\rho)} \right] + U(\rho) - E \right\} R_{m,k}(\rho) = 0. \quad (4)$$

Из (4) видно, что магнитное квантовое число m и квазиимпульс k выступают параметрами уравнения, а следовательно, и функции $R_{m,k}(\rho)$, которую имеет смысл искать в виде

$$R_{m,k}(\rho) = \begin{cases} R_{mk}^0(\rho), & \rho < \rho_0, \\ R_{mk}^1(\rho), & \rho_0 \leq \rho \leq \rho_1, \\ R_{mk}^0(\rho), & \rho > \rho_1. \end{cases} \quad (5)$$

Подстановка (5) в (4) приводит к трем однотипным уравнениям

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{m^2}{\rho^2} + \frac{2\mu_i}{\hbar^2} \left(E - U_i - \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu_i} \right) \right] R_{mk}^i(\rho) = 0, \quad (i = 0, 1, 2), \quad (6)$$

решениями которых являются линейные комбинации функций Ханкеля от разных аргументов

$$R_{mk}(\rho) = \begin{cases} R_{mk}^0(\rho) = A_m^{(0)} [H_m^-(\chi_0 \rho) + H_m^+(\chi_0 \rho)], & \rho < \rho_0, \\ R_{mk}^1(\rho) = A_m^{(1)} [H_m^-(i\chi_1 \rho) + S_{mk}^1(E) H_m^+(i\chi_1 \rho)], & \rho_0 \leq \rho \leq \rho_1, \\ R_{mk}^2(\rho) = A_m^{(2)} [H_m^-(\chi_0 \rho) + S_{mk}(E) H_m^+(\chi_0 \rho)], & \rho > \rho_1, \end{cases} \quad (7)$$

где

$$\chi_0 = \sqrt{\frac{2\mu_0}{\hbar^2} E - k^2}, \quad i\chi_1 = \sqrt{\frac{2\mu_1}{\hbar^2} (U - E) - k^2}. \quad (8)$$

Все коэффициенты A и обе S -матрицы однозначно определяются условиями непрерывности волновой функции и потока плотности вероятности на обеих границах раздела сред, а также условием нормировки.

В результате аналитических расчетов для $S_{mk}(E)$ получается следующее выражение:

$$S_{mk}(E) = \frac{\mu_0 F_m(E) H_m^-(\chi_0 \rho_1) - \mu_1 \chi_0 [H_{m-1}^-(\chi_0 \rho_1) - H_{m+1}^-(\chi_0 \rho_1)]}{\mu_0 F_m(E) H_m^+(\chi_0 \rho_1) - \mu_1 \chi_0 [H_{m-1}^+(\chi_0 \rho_1) - H_{m+1}^+(\chi_0 \rho_1)]}, \quad (9)$$

где

$$F_m(E) = \frac{i^{2m-1} \pi \chi_1 [I_{m-1}(\chi_1 \rho_1) + I_{m+1}(\chi_1 \rho_1)] + \chi_1 [K_{m-1}(\chi_1 \rho_1) + K_{m+1}(\chi_1 \rho_1)] [S_{mk}^1(E) - 1]}{i^{2m-1} \pi I_m(\chi_1 \rho_1) - K_m(\chi_1 \rho_1) [S_{mk}^1(E) - 1]}, \quad (10)$$

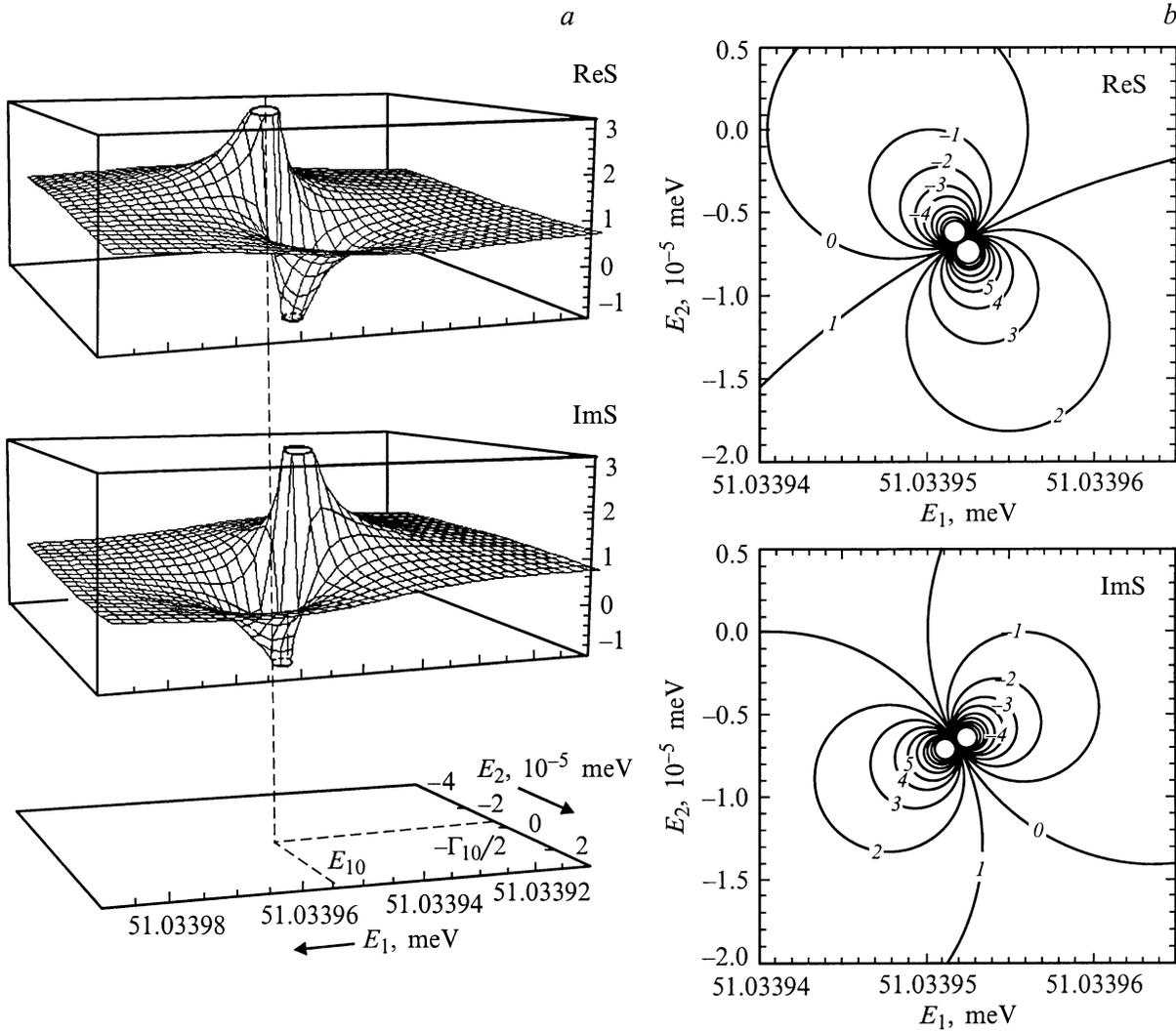


Рис. 2. Зависимости действительной и мнимой частей S -матрицы от $\tilde{E} = E_1 - iE_2$ и положение полюса на комплексной плоскости при $n_{\text{HgS}} = 15$, $n_{\text{CdS}} = 5$ (а), а также проекции линий одинаковой величины $\text{Re } S$ и $\text{Im } S$ на комплексную плоскость \tilde{E} ("топограмма") (б).

$$S_{mk}^1(E) = \frac{\mu_1 \chi_0 H_m^-(i\chi_1 \rho_0) [J_{m-1}(\chi_0 \rho_0) - J_{m+1}(\chi_0 \rho_0)] - \mu_0 \chi_1 J_m(\chi_0 \rho_0) [H_{m-1}^-(i\chi_1 \rho_0) - H_{m+1}^-(i\chi_1 \rho_0)]}{\mu_1 \chi_0 H_m^+(i\chi_1 \rho_0) [J_{m-1}(\chi_0 \rho_0) - J_{m+1}(\chi_0 \rho_0)] + \mu_0 i \chi_1 J_m(\chi_0 \rho_0) [H_{m-1}^+(i\chi_1 \rho_0) - H_{m+1}^+(i\chi_1 \rho_0)]}, \quad (11)$$

а $I_m(z)$ и $K_m(z)$ — модифицированные функции Бесселя (функции Бесселя мнимого аргумента). Матрица рассеяния $S_{mk}(E)$ является сложной комплексной функцией. Согласно общей теории [10], квазистационарные состояния определяются полюсами S -матрицы в комплексной плоскости энергий

$$\tilde{E} = E_1 - iE_2. \quad (12)$$

При этом действительная часть полюса E_1 равна энергии квазистационарного состояния, а мнимая $E_2 = \Gamma/2$ определяет уширение, связанное с вероятностью туннелирования квазичастицы сквозь барьер.

В отличие от S -матрицы для открытой сферической наногетеросистемы [9], где для случаев $l = 0, 1$ удалось получить решения дисперсионного уравнения в аналитическом виде, для исследуемой цилиндрической наносистемы подобная задача может быть решена только численными методами. Заметим также, что в этой задаче появился новый принципиальный момент: в одномерной задаче в отличие от нульмерной S -матрица зависит от двух переменных E и k . Это приводит к тому, что и энергия (E), и время жизни (τ) квазичастицы в

Таблица 1. Параметры кристаллов

Кристалл	μ_e/m_0	μ_h/m_0	$a, \text{\AA}$	E_g, eV	V_e, eV	V_h, eV
CdS	0.2	0.7	5.818	2.5	1.35	0.65
HgS	0.036	0.044	5.851	0.5	0	0

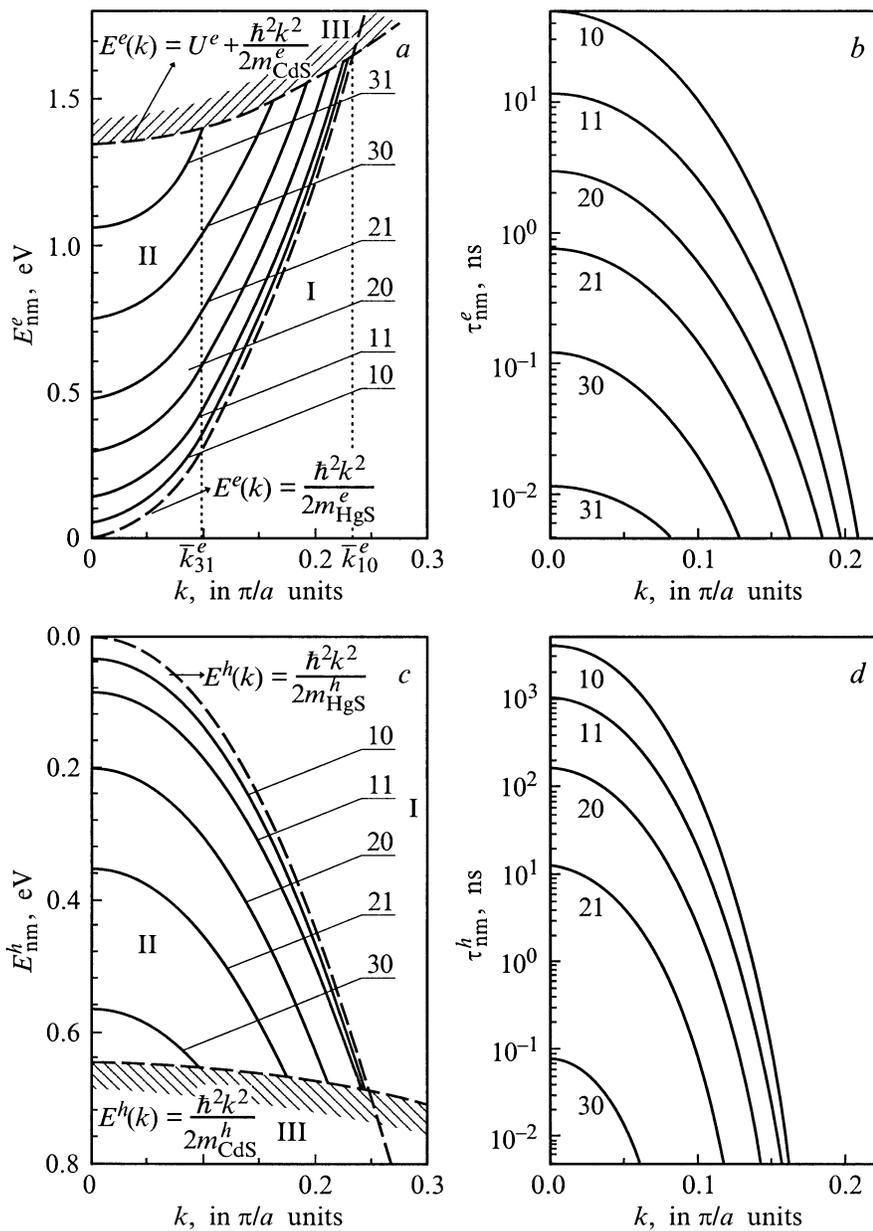


Рис. 3. Зависимость резонансных энергий электрона (a), дырки (c) и времен жизни электрона (b) и дырки (d) от продольного квазиимпульса для различных квазистационарных состояний.

квазистационарных состояниях оказываются функциями от квазиимпульса.

Пример численного расчета действительной и мнимой частей S -матрицы и положения ее полюса в комплексной плоскости энергий \tilde{E} приведен на рис. 2. Расчет выполнялся для электрона при $k = 0$ в СЦКП HgS/CdS/HgS с материальными параметрами, указанными в табл. 1, и с геометрическими параметрами $\rho_0 = 15a_{\text{HgS}}$, $\rho_1 - \rho_0 = 5a_{\text{CdS}}$. Результаты расчета приведены в окрестности энергии самого низкого квазистационарного состояния E_{10} ($n = 1, m = 0$).

Из рис. 2 видно, что S -матрица как функция комплексной переменной \tilde{E} имеет весьма характерное поведение:

и действительная, и мнимая ее части практически везде в комплексной плоскости являются плавными функциями и лишь в очень близкой окрестности полюса ($\sim 10^{-5}$ meV) они в одной и той же точке ($E_{10}, -i\Gamma_{10}/2$) претерпевают разрыв второго рода.

Таблица 2. Значения скоррелированных эффективных масс в резонансных состояниях

nm	10	11	20	21	30	31
μ_{nm}^e	0.0363	0.0371	0.0372	0.0376	0.0385	0.0391
μ_{nm}^h	0.0453	0.0461	0.0463	0.0477	0.0499	–

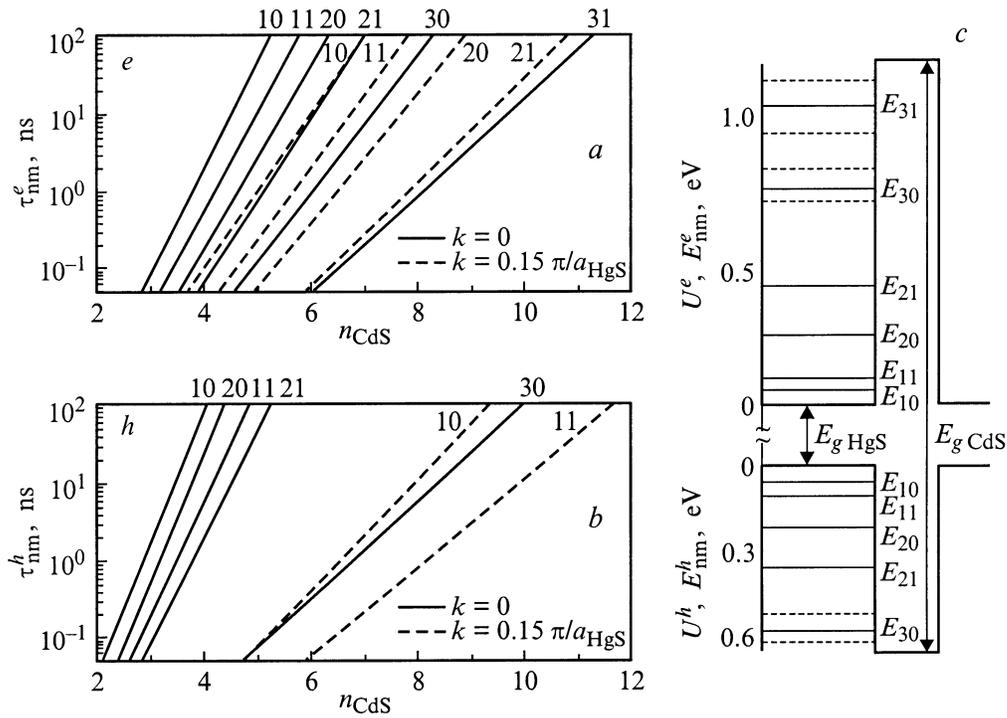


Рис. 4. Зависимости времен жизни электрона (а) и дырки (б) от толщины барьера при $n_{HgS} = 15$, схема потенциальной энергии электрона и дырки и положение резонансных уровней при $n_{HgS} = 15$, $n_{CdS} = 5$ (с).

2. Анализ и обсуждение результатов

Аналитический расчет S -матрицы и положения ее полюсов в комплексной плоскости энергий позволяют исследовать резонансные энергии (E) и времена жизни (τ) квазистационарных состояний электронов и дырок в зависимости от их квазиимпульса и геометрических размеров СЦКП.

На рис. 3 приведены результаты расчета резонансных энергий ($E_{nm}^{e,h}(k)$) и времен жизни ($\tau_{nm}^{e,h}(k)$) электронов и дырок в нескольких квазистационарных состояниях СЦКП HgS/CdS/HgS как функций продольного квазиимпульса (k) при $\rho_0 = 15a_{HgS}$, $\rho_1 - \rho_0 = 5a_{CdS}$. Там же приведены графики законов дисперсии квазичастиц в соответствующих составляющих СЦКП ($E_{HgS}^{e,h} = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu_{HgS}^{e,h}}$, $E_{CdS}^{e,h} = U^{e,h} + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu_{CdS}^{e,h}}$) в системах отсчета энергий, связанных с дном зоны проводимости HgS, для электрона (вверх) и с потолком валентной зоны HgS для дырки (вниз).

Как видно из рис. 3, кривые $E_{HgS}(k)$ и $E_{CdS}(k)$ разделяют плоскость (E, k) на три области: I — область, в которой S -матрица не имеет полюсов и, следовательно, квазичастицы не имеют здесь никаких состояний; II — область, в которой при определенных значениях квазиимпульса k S -матрица имеет полюса в плоскости комплексной энергии $\tilde{E} = E - i\Gamma/2$ с отличными от нуля действительной (E) и мнимой ($\Gamma/2$) частями, которые определяют резонансную энергию и время жизни $\tau \sim \Gamma^{-1}$ квазичастицы в этом квазистационарном состо-

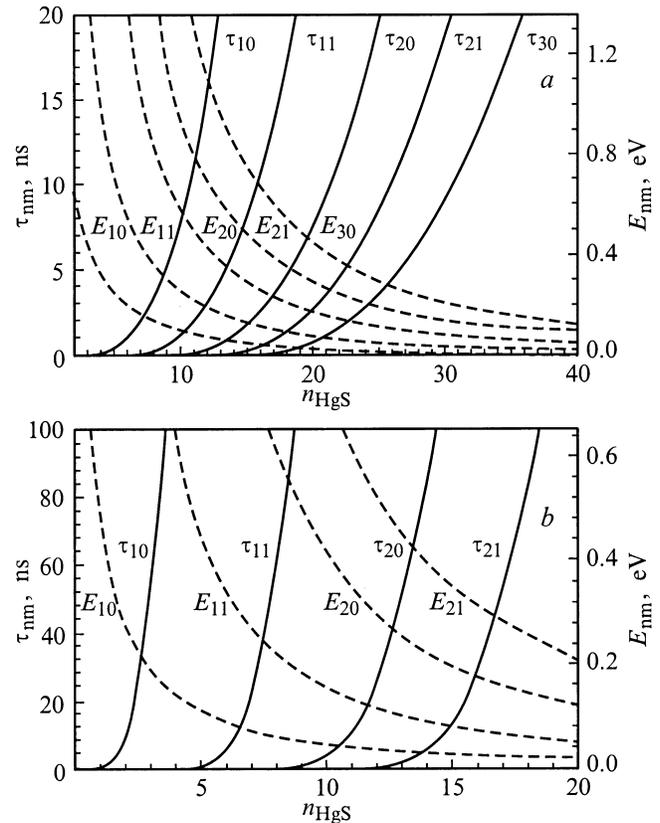


Рис. 5. Зависимости резонансных энергий E_{nm} (штриховые линии) и времен жизни τ_{nm} (сплошные линии) от ширины потенциальной ямы n_{HgS} при $n_{CdS} = 5$ для электрона (а) и дырки (б).

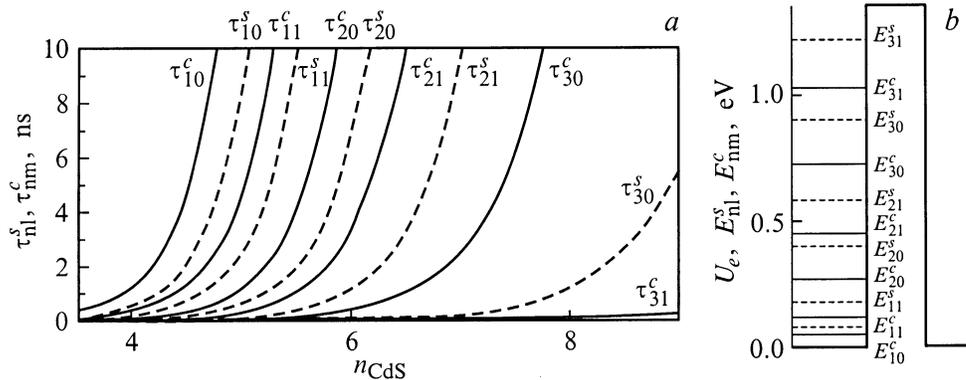


Рис. 6. Зависимость времен жизни электрона (а) и положение энергетических уровней (b) в СЦКП (сплошные линии) и СТКТ [9] (штриховые линии).

янии; III — область, в которой квазичастицы находятся в стационарных состояниях непрерывного спектра энергий ($|S| = 1$).

Подробнее проанализируем квазистационарные состояния электронов и дырок в наиболее интересной области II. Как видно, здесь образуется определенное число квазистационарных состояний, в которых электроны и дырки могут осуществлять движение вдоль внутреннего цилиндра СЦКП с квазиимпульсом k .

Количество зон определяется геометрическими размерами СЦКП, эффективной массой и потенциальной энергией квазичастицы. Главные особенности $E_{nm}^{e,h}(k)$ таковы. Зависимость энергии квазичастиц от квазиимпульса во всех резонансных состояниях очень хорошо аппроксимируется квадратичным законом $E_{nm}^{e,h}(k) = E_{nm}^{e,h} + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu_{nm}^{e,h}}$, где $E_{nm}^{e,h}$ определяется соответствующим полюсом S -матрицы при $k = 0$, а величины скоррелированных наличием разных сред в СЦКП эффективных масс квазичастиц $\mu_{nm}^{e,h}$ очень близки к соответствующим эффективным массам в HgS (табл. 2). С увеличением номера зоны (N) скоррелированная эффективная масса квазичастицы немного возрастает, так как при этом уменьшается ”эффективная высота” потенциального барьера и квазичастица при своем движении вдоль внутреннего цилиндра HgS все больше проникает в CdS, где ее эффективная масса больше, чем в HgS. Все зоны резонансных энергий квазичастиц (E_N) характеризуются максимальным значением продольного квазиимпульса $\bar{k}_{nm}^{e,h}$, величина которого меньше (и даже значительно) π/a . Значение $\bar{k}_{nm}^{e,h}$ определяется из уравнения

$$E_N^{e,h}(k) = U^{e,h} + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu_{CdS}^{e,h}}, \quad (13)$$

причем очевидно, что чем больше N , тем меньше величина $\bar{k}_{nm}^{e,h}$.

Важной особенностью резонансного спектра квазичастиц в открытой СЦКП является то, что время жизни ($\tau_{nm}^{e,h}$) квазичастицы в определенном состоянии (nm) очень сильно (экспоненциально) уменьшается с увеличением продольного квазиимпульса (рис. 3, b, d). На-

пример, как видно из рис. 3, b, время жизни электрона в состоянии (10) при $k = 0.2$ на 3 порядка меньше, чем при $k = 0$. Физически это понятно, так как с увеличением k уменьшается ”эффективная высота” потенциального барьера и квазичастица с большей вероятностью проникает в забарьерное пространство СЦКП. По той же причине резко уменьшаются времена жизни квазичастиц с увеличением N .

В связи с обнаруженной особенностью открытой СЦКП можно заключить, что она может выполнять роль сепаратора квазичастиц по квазиимпульсам в нанотехнологических конструкциях: отсеивать (через барьер) быстрые и пропускать медленные квазичастицы, движущиеся во внутреннем цилиндре — яме.

На рис. 4 приведены результаты расчета зависимостей энергий (E_{nm}) и времен жизни ($\tau_{nm} = \hbar/\Gamma_{nm}$) электрона и дырки в состояниях с магнитными квантовыми числами $m = 0$ и 1 при $k = 0$ (сплошные линии) и при $k = 0.15$ (штриховые линии) от геометрических размеров цилиндрической наносистемы. Поскольку положения резонансных энергетических уровней (E_{nm}) электрона и дырки практически не изменяются, то их значения схематически изображены на рис. 4, c, а зависимости времен жизни электрона и дырки (τ_{nm}) от количества монослоев CdS (n_{CdS}) представлены на рис. 4, a и b соответственно.

Независимо от величины квазиимпульса с увеличением толщины барьера время жизни обеих квазичастиц экспоненциально увеличивается во всех состояниях. При фиксированной толщине барьера время жизни тем больше, чем меньше энергия соответствующего состояния. Это понятно из физических соображений, поскольку уменьшение энергии квазичастиц в фиксированном состоянии эквивалентно увеличению ”эффективной мощности барьера”, что препятствует проникновению их через барьер, а значит, увеличивает время жизни в квантовой яме. Поскольку $m_h > m_e$, то при равных условиях время жизни дырки всегда больше, чем время жизни электрона, так как дырке труднее проникать сквозь барьер.

На рис. 5 приведены результаты расчета зависимостей энергий E_{nm} и времен жизни τ_{nm} электрона (а) и дырки (б) от толщины материала-ямы (n_{HgS}) при фиксированной толщине ($n_{\text{CdS}} = 5$) материала-барьера. Из рис. 5 видно, что увеличение ширины квантовой ямы приводит к уменьшению абсолютной величины энергии основного состояния по квадратичному закону. При этом, как уже отмечалось, время жизни электрона или дырки в соответствующих состояниях увеличивается.

Интересно сравнить энергии и времена жизни квазичастиц в СЦКП и соответствующей ССКТ с одинаковыми радиусами ям и толщиной барьеров. При этом поскольку симметрия систем различная, имеет смысл сравнивать между собой лишь те энергетические уровни (и соответствующие времена жизни), которые соответствуют одинаковому порядковому номеру, отсчитанному от нижнего уровня.

Тогда, как видно из рис. 6, при $k = 0$ и одинаковых геометрических размерах ям и барьеров СЦКП и ССКТ соответствующие уровни в квантовой проволоке всегда расположены ниже (а времена жизни в этих состояниях больше), чем в квантовой точке. Полученный результат физически понятен, так как при равных условиях объем цилиндрической ямы является бесконечно большим по сравнению с объемом сферической ямы, поэтому соответствующие уровни в квантовой проволоке расположены ниже, чем в квантовой точке, а вследствие этого и "мощность" барьера в квантовой проволоке больше, чем в квантовой точке, что и отражено в соотношении времен жизни.

Таким образом, метод S -матрицы позволяет рассчитать спектральные характеристики как сложных сферических [9], так и цилиндрических открытых квантовых наногетеросистем с резонансными квазистационарными состояниями. Общий вывод состоит в том, что положения энергетических уровней электрона и дырки мало чувствительны к толщине барьеров, но очень чувствительны к ширине квантовых ям. Время жизни квазичастиц в квазистационарных состояниях очень существенно изменяются при изменении как ширины ямы, так и ширины барьеров. Экспоненциальное уменьшение времен жизни квазичастиц в резонансных состояниях с увеличением их квазиимпульсов создает принципиальную возможность использования открытых СЦКП в качестве пространственных сепараторов квазичастиц по их скоростям в элементах нанотехнологических конструкций.

Список литературы

- [1] S. Simhony, E. Kapon, T. Colas, D.M. Hwang, N.G. Stoffel, P. Worland. Appl. Phys. Lett. **59**, 2225 (1991).
- [2] N. Kirstaedter et al. Electron. Lett. **30**, 1416 (1994).
- [3] D. Schooss, A. Mews, A. Eychmuller, H. Weller. Phys. Rev. **B49**, 17 072 (1994).
- [4] A. Mews, A.V. Kadavanich, U. Banin, A.P. Alivasatos. Phys. Rev. **B53**, 13 242 (1996).
- [5] Н.В. Ткач, В.А. Головацкий, О.Н. Войцеховская, М.Я. Минькова. УФЖ **43**, 745 (1998).
- [6] Н.В. Ткач. ФТТ **39**, 1109 (1997).
- [7] М. Tkach. Journal of Physical Studies **3**, 377 (1999).
- [8] Das Sarma, V.B. Campos. Phys. Rev. **B49**, 1867 (1994).
- [9] Н.В. Ткач, В.А. Головацкий. ФТТ **41**, 2081 (1999).
- [10] А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов. Рассеяния, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. Наука, М. (1971). 463 с.
- [11] K.C. Yung, J.H. Yee. Phys. Rev. **A50**, 104 (1994).
- [12] G.O. Hai, F.M. Peeters, J.T. Devreese. Phys. Rev. **B48**, 4666 (1993).