# Эволюция квазистационарных состояний электрона в открытой сферической квантовой точке

© Н.В. Ткач, Ю.А. Сети

Черновицкий национальный университет им. Юрия Федьковича, Черновцы, Украина

E-mail: ktf@chnu.edu.ua

(Поступила в Редакцию 14 марта 2008 г. В окончательной редакции 10 июня 2008 г.)

На основе модели эффективных масс и прямоугольного потенциального барьера предложена теория эволюции спектральных параметров квазистационарных состояний электрона в открытой сферической квантовой точке. Введены понятия функций распределения (по квазиимпульсу или энергии) вероятности нахождения электрона внутри открытой квантовой точки и их спектральных характеристик — обобщенных резонансных энергий и ширин.

При изменении толщины слоя-барьера от нуля до бесконечности обобщенные резонансные энергии и ширины, определенные методом функций распределения, удовлетворяют принципу неопределенности Гейзенберга, тогда как резонансные энергии и ширины, определенные полюсами *S*-матрицы, при малых толщинах барьера ему не удовлетворяют.

PACS: 71.15.Dx, 73.21.La, 73.22.Dj, 73.90.+f

### 1. Введение

В отличие от закрытых квантовых точек (КТ), проволок и пленок, которые уже давно и детально изучаются [1–8], открытым наносистемам до недавнего времени уделялось очень мало внимания. Это вполне естественно, поскольку исследователей интересовали главным образом такие физические системы, в которых оптические явления, обусловленные взаимодействием квазичастиц, характеризовались бы минимально "размытыми" спектрами. Именно этому требованию хорошо удовлетворяли закрытые наносистемы с точными пространственными размерами: квантовые пленки, проволоки и особенно точки.

Тем не менее было ясно, что, хотя спектр квазичастиц в открытых системах является квазистационарным, т.е. изначально "размытым" из-за возможности выхода квазичастиц во внешнюю среду, такие системы имеют дополнительный управляемый (например, внешним полем) канал релаксации энергии, и потому они могут служить элементной базой для прецизионных наноустройств резонансно-туннельного типа. Интерес к открытым наносистемам усилился и в связи с тем, что, как оказалось, они находят различные способы применения в микробиологии и медицине [9–11].

Открытые наносистемы интересны и как объект исследования фундаментальных физических задач, так как до сих пор нет последовательной теории квазистационарных спектров электронов и экситонов, а также взаимодействия этих квазичастиц как между собой, так и с классическими (электромагнитное) и с квантоваными (фононы) полями в наногетеросистемах. Квазистационарный спектр электронов в открытых сферических квантовых точках (ОСКТ) и в квантовых проволоках теоретически исследовался методом *S*-матрицы в работах [12–16]. Поскольку расчет резонансных энергий (РЭ) и резонансных ширин (РШ) выполнялся там через комплексные полюса *S*-матрицы, согласно общей теории [17], он справедлив для наносистем с достаточно мощными потенциальными барьерами.

Так как открытые наносистемы со слабыми (ультратонкими) потенциальными барьерами [18,19] могут служить элементной базой резонансно-туннельных устройств, то они представляют наибольший практический интерес. Однако именно для наносистем с тонкими барьерами расчет спектральных параметров (РЭ и РШ) методом комплексных полюсов *S*-матрицы неприменим из-за нарушения принципа неопределенности Гейзенберга.

Цель предлагаемой работы состоит в том, чтобы в модели эффективных масс и прямоугольных потенциальных барьеров разработать такой метод расчета энергетических параметров электрона, который был бы справедлив для ОСКТ с произвольной толщиной слоя-барьера — от нуля до бесконечности. Будет показано, что универсальными характеристиками, которые корректно (не нарушая принцип Гейзенберга) описывают эволюцию квазистационарных состояний (КСС) электрона в зависимости от толщины слоябарьера, являются функции распределения вероятности нахождения электрона внутри квантовой точки и их спектральные параметры — обобщенные резонансные энергии (ОРЭ) и обобщенные резонансные ширины (ОРШ).



**Рис. 1.** Геометрическая и энергетическая схемы простой открытой сферической квантовой точки.

## S-матрица и функции распределения вероятности нахождения электрона внутри открытой сферической квантовой точки

Чтобы изучить эволюцию сферически-симметричных КСС электрона в ОСКТ, будем исследовать ту же модель, что и в работе [12]. Предполагается, что ОСКТ представляет собой полупроводниковую сферу радиуса  $r_0$ , которая окружена слоем-барьером толщиной  $\Delta$  и помещена во внешнюю среду (рис. 1).

В приближении эффективной массы и прямоугольного потенциального барьера

$$m(r) = \begin{cases} m_0, \\ m_1, \end{cases}$$

$$U(r) = \begin{cases} 0, & 0 \le r \le r_0, \quad r_0 + \Delta \le r < \infty, \\ U, & r_0 \le r \le r_1 = r_0 + \Delta \end{cases}$$
(1)

уравнение Шредингера

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

в случае сферически-симметричных состояний (l = 0) имеет решением волновую функцию

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R(r).$$
(3)

В области энергий  $E \leq U$  радиальную функцию R(r) удобно искать в виде линейных комбинаций функций Ханкеля

$$R_{lk} = \begin{cases} R_l^{(0)}(kr) = a_l^{(0)} \Big[ h_l^-(kr) + h_l^+(kr) \Big], & 0 \le r \le r_0, \\ R_l^{(1)}(kr) = a_l^{(1)} \Big[ h_l^-(i\chi r) + S_l^{(1)} h_l^+(i\chi r) \Big], \\ & r_0 \le r \le r_1 = r_0 + \Delta, \\ R_l^{(2)}(kr) = a_l^{(2)} \Big[ h_l^-(kr) + S_l h_l^+(kr) \Big], \\ & r_0 + \Delta \le r < \infty, \end{cases}$$

$$(4)$$

где

$$k = \frac{\sqrt{2m_0E}}{\hbar}, \quad \chi = \sqrt{\frac{m_1}{m_0}(k_0^2 - k^2)}, \quad k_0 = \frac{\sqrt{2m_0U}}{\hbar}.$$
 (5)

Условия непрерывности радиальной волновой функции (4) и потока плотности вероятности на обеих границах наносистемы

$$R_{l}^{(0)}(kr_{0}) = R_{l}^{(1)}(i\chi r_{0}), \quad \frac{dR_{l}^{(0)}(kr)}{m_{0}dr}\Big|_{r=r_{0}} = \frac{dR_{l}^{(1)}(i\chi r)}{m_{1}dr}\Big|_{r=r_{0}},$$

$$R_{l}^{(1)}(i\chi r_{1}) = R_{l}^{(2)}(kr_{1}), \quad \frac{dR_{l}^{(1)}(i\chi r)}{m_{1}dr}\Big|_{r=r_{1}} = \frac{dR_{l}^{(2)}(kr)}{m_{0}dr}\Big|_{r=r_{1}},$$
(6)

а также условие нормировки

$$\int_{0}^{\infty} R^*(kr)R(kr)r^2dr = \delta(k-k')$$
(7)

однозначно определяют все коэффициенты и *S*-матрицу, которую целесообразно представить в аналитическом виде

$$S(k) = e^{-2ikr_1} \frac{1 + iZ(k)}{1 - iZ(k)},$$
(8)

где

$$Z(k) = \frac{kr_1}{1 - \frac{m_0}{m_1} \left\{ 1 - \chi r_1 \frac{1 + \xi(k) \exp(-2\chi\Delta)}{1 - \xi(k) \exp(-2\chi\Delta)} \right\}},$$
 (9)

$$\xi(k) = \frac{m_1 k r_0 \operatorname{ctg} k r_0 - m_0 \chi r_0 + m_0 - m_1}{m_1 k r_0 \operatorname{ctg} k r_0 + m_0 \chi r_0 + m_0 - m_1}.$$
 (10)

Матрица (8) совпадает с найденной ранее в работе [12], но ее представление через действительную функцию Z(k) имеет преимущества, которые будут видны далее. В частности, представление (8) сохраняется и в области  $k > k_0$  (E > U) при условии замены  $\chi \rightarrow i\chi$  в функции Z(k).

Введем теперь функции распределения W(k)или W(E) (по квазиимпульсу или энергии) вероятности нахождения электрона внутри ОСКТ (в сфере радиуса  $r_1 = r_0 + \Delta$ ). По определению

$$W(k) = \frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} |X(kr)|^2 dr, \quad W(E) = \frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} |X_E(r)| dr, \quad (11)$$

где

$$X(kr) = rR(kr), \quad X_E = rR_E(r).$$
(12)

Расчет функций распределения выполняется точно в аналитическом виде. Действительно, рассматривая уравнения Шредингера (2) для двух близких значений энергий (E и  $E_1$ ), получим

$$W(E) = \frac{1}{r_1} \frac{\hbar^2}{2m_0} \\ \times \lim_{E_1 \to E} \frac{1}{E_1 - E} \left( X_{E_1}(r) X'_E(r) - X'_{E_1}(r) X_E(r) \right) \Big|_{r=r_1}.$$
 (13)

Так как в области  $r \leq r_1$ , где U(r) = 0, согласно общей теории [17], функция  $X_E^{(2)}(r)$  имеет вид

$$X_E^{(2)}(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(kr + \delta),$$
 (14)

где фаза *б* связана с *S*-матрицей соотношением

$$S(k) = e^{2i\delta(k)},\tag{15}$$

то после простых преобразований получим

$$W(k) = \frac{1}{\pi r_1} \left\{ r_1 + \frac{d\delta(k)}{dk} - \frac{1}{2k} \sin 2(kr_1 + \delta(k)) \right\}.$$
 (16)

С учетом аналитического выражения для S-матрицы (8) и ее связи с фазой  $\delta(k)$  [15] теперь получается точное и удобное для расчетов выражение для функции распределения вероятности в области  $k \leq k_0$ 

$$W(k) = \frac{kr_1}{\pi} \times \frac{\sqrt{\frac{m_0}{m_1}} \frac{k}{\chi} \left(\xi^2 + \exp(-4\chi\Delta)\right) + 2\exp(-2\chi\Delta) \left(\chi \frac{m_0}{m_1} \xi' - \sqrt{\frac{m_0}{m_1}} 2\xi\Delta\right)}{\left[1 + Z^2\right] \left[\chi r_1 \frac{m_0}{m_1} \left(\xi + \exp(-2\chi\Delta)\right) + \frac{m_1 - m_0}{m_1} \left(\xi - \exp(-2\chi\Delta)\right)\right]},$$
(17)

где

$$\xi' = 2 \frac{m_0}{m_1} r_0$$

$$\times \frac{k \chi r_0^2 (1 + \operatorname{ctg}^2 k r_0) - \left(1 + \sqrt{\frac{m_1}{m_0}} \frac{k^2}{\chi^2}\right) \chi r_0 \operatorname{ctg} k r_0 + \frac{m_1 - m_0}{m_1} \sqrt{\frac{m_1}{m_0}} \frac{k}{\chi}}{\left[k r_0 \operatorname{ctg} k r_0 - \frac{m_0}{m_1} \chi r_0 - \frac{m_1 - m_0}{m_1}\right]^2}.$$
(18)

Выражение (17) для функции распределения W(k) остается справедливым и в области  $k \ge k_0$  ( $E \ge U$ ), если в нем выполнить замену  $\chi \to i\chi$ . Далее будет показано, что именно функции распределения W(k) (или W(E)) в отличие от полюсов S(k)-матрицы в комплексной плоскости содержат полную информацию о виртуальных, квазистационарных и стационарных (при  $\Delta \to \infty$ ) состояниях электрона в ОСКТ, независимо от размеров потенциального барьера.

## 3. Эволюция квазистационарных состояний электрона в открытой сферической квантовой точке

Развитая в предыдущем разделе теория позволяет выполнить расчет функций распределения вероятности нахождения электрона в OCKT. Расчет выполнялся на примере наносистемы HgS/CdS/HgS с физическими параметрами [18,19]

$$m_0 = 0.036m_e, \quad m_1 = 0.2m_e, \quad U = 1350 \,\mathrm{meV},$$

$$a_{\text{HgS}} = a_0 = 5.851 \text{ Å}, \quad a_{\text{CdS}} = a_1 = 5.818 \text{ Å}.$$

Прежде чем детально анализировать обобщенные резонансные энергии и полуширины как спектральные характеристики функций W(k) и W(E), изучим основные свойства этих функций. Это даст возможность так определить понятия ОРЭ и ОРШ квазистационарных состояний, чтобы они были справедливыми на всем бесконечном интервале изменения толщины потенциального барьера  $\Delta$ , а при  $\chi \Delta > 1$  полностью совпадали бы с теми РЭ и РШ, которые, согласно общей теории [17], определяются полюсами *S*-матрицы в комплексной плоскости.

Рассчитанные функции распределения  $W(\mathcal{K} = kr_0)$ и W(E) представлены на рис. 2. Анализ показывает, что свойства этих функций существенно разные в разных интервалах изменения толщины  $\Delta$ . Условно можно выделить три интервала толщин барьеров: а) малые  $(0 \le \Delta \ll r_0)$ ; b) соразмерные  $(\Delta \le r_0)$ ; c) большие  $(\Delta > r_0)$ .

Проанализируем сначала свойства функций  $W(\mathcal{K})$ и W(E) в области малых значений  $\Delta$  (рис. 2). При отсутствии потенциального барьера ( $\Delta = 0$ ) из аналитического выражения для функции распределения вероятности

$$W(\mathscr{K})\big|_{\Delta=0} = \frac{1}{\pi} \left(1 - j_0(\mathscr{K})\right)$$
$$= \frac{1}{\pi} \left(1 - \frac{\sin 2\mathscr{K}}{2\mathscr{K}}\right), \quad (\mathscr{K} = kr_0), \quad (19)$$

и из рис. 2 видно, что функции  $W(\mathcal{K})$  и W(E) описывают квазипериодические колебания относительно среднего значения

$$\overline{W}\big|_{\Delta=0} = \lim_{A \to \infty} \frac{1}{A} \int_{0}^{\infty} W(\mathcal{K}) d\mathcal{K} = \frac{1}{\pi}, \qquad (20)$$

последовательно принимая минимальные  $(W_n^<)$  и максимальные  $(W_n^>)$  значения  $W_n^> = \frac{2}{\pi} \sin^2 k_n^> r_0$ ,  $W_n^< = \frac{2}{\pi} \sin^2 k_n^< r_0$   $(n = 0, 1, 2, ..., \infty)$  при  $k_n^< = \frac{K_{2n}}{r_0}$ ,  $k_n^> = \frac{K_{2n+1}}{r_0}$ , где  $K_{2n}$  и  $K_{2n+1}$  являются четными и нечетными корнями уравнения

$$W'(\mathcal{K})\big|_{\Delta=0} = 0,$$
 или  $\mathcal{K}$ ctg $\mathcal{K} = 1.$  (21)



**Рис. 2.** Эволюция функции распределения  $W(\mathcal{K})$  и W(E) с изменением толщины слоя-барьера  $\Delta$  при  $r_0 = 30a_0$ .

Колебания функций  $W(\mathscr{K})$  и W(E) в шкалах  $\mathscr{K}$ и E соответственно образуют непрерывную последовательность пиков ( $n = 1, 2, 3, ... \infty$ ), каждый из которых характеризуется некоторым положением максимума и шириной. Так как это справедливо для произвольных значений  $\Delta$ , целесообразно ввести две главные спектральные характеристики n-го пика: обобщенную резонансную энергию  $E_n^w = \frac{\hbar^2 (k_n^z)^2}{2m_0}$ , соответствующую максимальному значению  $W_n(\mathscr{K}_n^z)$ , и обобщенную резонансную ширину  $\Gamma_n^w = E_n^{(+)} - E_n^{(-)}$ , где энергии  $E_n^{(\pm)}$  являются решениями уравнения, определяемого естественным условием (рис. 2)

$$2W(E) = W(\mathcal{K}_n^{>}) + W(\mathcal{K}_n^{<}).$$
<sup>(22)</sup>

Из рис. 2, *а*, *с* видно, что с увеличением  $\Delta$  высо́ты всех подбарьерных пиков увеличиваются в окрестностях резонансных значений энергий за счет уменьшения  $W(\mathcal{K})$  в интервалах между резонансами. Таким образом, с

увеличением толщины барьера  $\Delta$  эти пики больше приобретают форму кривых квазилоренцевого типа.

С увеличением  $\Delta$  ОРЭ  $(E_n^w)$  изменяются слабо, а ОРШ  $(\Gamma_n^w)$  резко уменьшаются. Существенной разницы в спектральных характеристиках подбарьерных и близких к величине U надбарьерных состояний при очень малых толщинах (рис. 2, c, пики n = 1-10) не наблюдается. С физической точки зрения это означает, что появление в пространстве "маломощного" потенциального барьера не очень сильно изменяет спектр КСС электрона в области энергий, соизмеримых с величиной потенциала U (или  $\mathcal{K}_0$  в пространстве  $\mathcal{K}$ ).

Однако при  $\Delta \neq 0$  во всем интервале энергий  $(0 \leq E < \infty)$  или квазиимпульсов  $(0 \leq \mathcal{K} < \infty)$  появление потенциального барьера приводит к существенному, качественному изменению спектра КСС — на кривых  $W(\mathcal{K})$  и W(E) появляется бесконечное количество цугов (рис. 2, *b*, *d*). Цуг КСС состоит из группы пиков — от наименьшего низкоэнергетического (например, 15-й на рис. 2, *d*) до наименьшего высокоэнергетического (например, 28-й на рис. 2, *d*).

Из рис. 2 видно, что в подбарьерной области квазиимпульсов (энергий) увеличение толщины  $\Delta$  независимо от ее величины относительно  $r_0$  приводит к постепенному превращению всех пиков в  $\delta$ -образные функции с максимумами при  $\mathcal{K} \sim \mathcal{K}_n$ . В пределе  $\Delta \to \infty$  ОРШ этих состояний стремятся к нулю ( $\Gamma_n^w \to 0$ ), а их ОРЭ ( $E_n^w$ ) совпадают со стационарным энергетическим спектром ( $E_n^c$ ) электрона в закрытой сферической КТ, как и должно быть из физических соображений.

Формирование квазистационарного спектра в области надбарьерных энергий более разнообразно. С увеличением  $\Delta$  количество пиков в каждом цуге уменьшается, а их спектральные характеристики эволюционируют довольно сложным образом, что будет видно далее. Когда толщина барьера  $\Delta$  меньше, но сравнима с  $r_0$ (рис. 2, *e*), цуги начинают "размываться", а затем образуется новая форма — появляются своеобразные пакеты КСС (рис. 2, *f*). Каждый пакет состоит из группы пиков (например, n = 40-47). С увеличением толщины  $\Delta$ количество пиков в каждом пакете увеличивается, а размеры пакетов уменьшаются до некоторых минимальных значений (рис. 2, *f*).

В каждом пакете выделяется один максимальный пик, соответствующий так называемому виртуальному КСС [17]. Виртуальные КСС, как и любые другие, характеризуются своими ОРЭ  $E_N^v$  и ОРШ  $\Gamma_N^v$ . По определению в каждом виртуальном состоянии вероятность нахождения электрона внутри КТ максимальная по сравнению с другими КСС из того же пакета. Последовательности N = 1, 2, 3, 4, 5 виртуальных состояний на рис. 2, *f*, например, соответствует последовательность КСС общей нумерации n = 18, 27, 35, 43, 50. Поскольку с увеличением  $\Delta$  произвольное *n*-е квазистационарное состояние в надбарьерной области сдвигается только в область меньших значений квазиимпульсов  $\mathcal{K} > \mathcal{K}_0$ (или E > V) в одно и то же виртуальное состояние (N) последовательно попадают КСС с постепенно увеличивающимися номерами *n*.

Особо следует отметить эволюцию первого надбарьерного КСС (n = 7), которое также является виртуальным. Его эволюция с увеличением  $\Delta$  более похожа на эволюцию подбарьерных КСС, т. е. ОРЭ слабо изменяется, а ОРШ уменьшается, и при  $\Delta \to \infty \Gamma^{\upsilon} \to 0$ . В этом состоянии электрон является уже практически связанным и с большой вероятностью находится внутри КТ.

Переходя теперь к анализу спектральных параметров ОРЭ и ОРШ КСС электрона в ОСКТ, заметим, что они должны удовлетворять принципу неопределенности Гейзенберга во всем интервале изменения толщины барьера ( $0 \le \Delta < \infty$ ), а при больших толщинах совпадать с РЭ и РШ, рассчитанных через комплексные полюса *S*-матрицы рассеивания.

То, что необходимые требования к ОРЭ и ОРШ удовлетворяются, видно из рис. 3, на котором приведены зависимости от толщины барьера  $\Delta$  величин  $E_n^w$ ,  $\Gamma_n^w$ и  $E_n^s$ ,  $\Gamma_n^s$ . Из рис. 3, *a*, *b* видно, что в подбарьерной области энергий (E < U) в ОСКТ с толщиной слоябарьера  $\Delta$  порядка и больше толщины  $(a_0)$  одного монослоя спектральные параметры КСС  $(E_n^w, E_n^s \, \bowtie \, \Gamma_n^w)$  $\Gamma_n^s$ ), определенные через функцию W и S-матрицу, совпадают между собой тем точнее, чем больше  $\Delta$ . Если же толщина  $\Delta$  меньше  $a_0$ , то с уменьшением до нуля РЭ  $E_n^s$  также стремится к нулю, а РШ  $\Gamma_n^s$ увеличиваются, стремясь к бесконечности. Это приводит к тому, что величины  $\alpha_n^s(\Delta) = E_n^s / \Gamma_n^s$  (штриховые кривые на вставке к рис. 3, a) при малых значениях  $\Delta$ становятся меньше 1/2, чем нарушается принцип Гейзенберга  $(E_n t_n = \hbar E_n / \Gamma_n = \hbar \alpha_n^s \ge \hbar / 2)$ . Что же касается ОРЭ  $E_n^w$  и ОРШ  $\Gamma_n^w$ , то, как видно из рис. 3, *a*, *b*, при уменьшении  $\Delta$  вплоть до нуля оба параметра стремятся к конечным значениям так, что принцип Гейзенберга не нарушается (сплошные кривые на вставке к рис. 3, a). Наконец, стоит заметить, что при  $\Delta \to \infty$   $\Gamma_n^w \to \Gamma_n^s \to 0$ , а  $E_n^w \to E_n^s \to E_n^c$ , где  $E_n^c$  — энергетические уровни связанных стационарных состояний электрона в закрытой КТ.

Эволюция спектральных параметров  $(E_{n>8}^{(w,s)}, \Gamma_{n>8}^{(w,s)})$ надбарьерных ( $E \ge U$ ) КСС существенно отличается от подбарьерных (рис. 3, c, d). Из рисунка видно, что с увеличением  $\Delta$  практически совпадающие между собой ОРЭ  $(E_{n>7}^w)$  и РЭ  $(E_{n>7}^s)$  смещаются в область меньших энергий  $(E \ge U)$ , образуя антикроссинги ("бутылочные горла") в окрестностях энергий, близких к энергиям  $(E_n^c)$  стационарных состояний электрона в закрытой КТ радиуса  $r_0$  с потенциальным барьером  $U \to \infty$ . Антикроссинги, как и в закрытых КТ [15], являются следствием "отталкивания" каждой пары сближающихся уровней энергии  $(E_n^w)$ , происходящих от бесконечно глубокой внутренней сферы-ямы радиуса r<sub>0</sub> (штрихпунктирные линии на рис. 3, d), и уровней ( $E_n^b$ ) бесконечно глубокой потенциальной ямы слоя-барьера толщины  $\Delta$ (пунктирные линии на рис. 3, d).



**Рис. 3.** Зависимости спектральных параметров  $E_n^{(w,s)}$  и  $\Gamma_n^{(w,s)}$  от толщины слоя-барьера  $\Delta$  при  $r_0 = 30a_0$ .

Из рис. 3 видно, что максимумам на кривых  $\Gamma_n^w$ ,  $\Gamma_n^s$ соответствуют те точки на линиях  $E_n^w$ ,  $E_n^s$  (кружки на кривых рис. 3, d), которые расположены в окрестностях антикроссингов так, что попадают на условные линии (пунктирные кривые) "барьерных" уровней. Это означает, что в таких КСС электрон с большей вероятностью находится в слое-барьере, чем ядре-яме, а потому он быстрее выходит из КТ. Времена жизни в таких КСС минимальные, следовательно  $\Gamma_n^w$ ,  $\Gamma_n^s$  — максимальные (что видно из рис. 3, с). Теперь немонотонная эволюция спектральных параметров  $\Gamma_n^s$ ,  $\Gamma_n^w$  (рис. 3, c) в зависимости от толщины барьера  $\Delta$  вполне понятна. С увеличением  $\Delta$  надбарьерные КСС, сдвигаясь в низкоэнергетическую область к энергии U, последовательно проходят то окрестности энергетических уровней бесконечно глубокой потенциальной ямы внутреннего ядра (штрихпунктирные линии на рис. 3, d), то окрестности энергетических уровней бесконечно глубокой потенциальной ямы слоя-барьера (пунктирные линии на рис. 3, d). В соответствии с этим изменяются времена жизни КСС, а значит, с увеличением  $\Delta$  немонотонно изменяются и величины  $\Gamma_s^n$ ,  $\Gamma_w^w$ .

Наконец, из рис. 3, *c*, *d* видно, что величины  $E_n^w$  и  $E_n^s$  как функции  $\Delta$  практически совпадают для всех надбарьерных КСС (на рисунке они неразличимы), а величины  $\Gamma_n^w$  и  $\Gamma_n^s$  хорошо совпадают в минимумах, но значительно не совпадают в максимумах.

#### 4. Заключение

Расчет спектральных параметров (РЭ и РШ) сферически-симметричных квазистационарных состояний электронов в ОСКТ методом комплексных полюсов *S*-матрицы применим в широком интервале значений

985

толщин слоя-барьера ( $\Delta$ ), за исключением малых толщин ( $\Delta \ll r_0$ ), где его результаты входят в противоречие с принципом неопределенности Гейзенберга.

Функции распределения W(k), W(E) вероятности нахождения электрона внутри ОСКТ и их спектральные параметры (ОРЭ и ОРШ) корректно (не нарушая принцип Гейзенберга) описывают эволюцию всех сферически-симметричных КСС на всем бесконечном интервале изменения толщины ( $\Delta$ ) слоя-барьера.

Предложенный метод расчета ОРЭ и ОРШ при соответствующей модификации вполне применим и к многослойным открытым квантовым точкам, проволокам и пленкам. В связи с этим он может быть весьма актуален для оценки величин резонансных энергий и ширин КСС резонансно-туннельных устройств, работающих на базе открытых наносистем с тонкими слоями-барьерами.

#### Список литературы

- [1] Ж.И. Алфёров. ФТП 32, 1, 3 (1998).
- [2] Н.Н. Леденцов, В.М. Устинов, А.Ю. Егоров, А.Е. Жуков, М.В. Максимов, И.Г. Табатадзе, П.С. Копьев. ФТП 28, 8, 1483 (1994).
- [3] В.П. Евтихиев, И.В. Кудряшов, Е.Ю. Котельников, В.Е. Токранов, А.Н. Титков, И.С. Тарасов, Ж.И. Алфёров. ФТП 32, 12, 1482 (1998).
- [4] G.Q. Hai, F.M. Peeters, J.T. Devreese, L. Wendler. Phys. Rev. B 48, 16, 12016 (1993).
- [5] X.F. Wang, X.L. Lei. Phys. Rev. B 49, 7, 4780 (1994).
- [6] Н.В. Ткач. ФТТ **39**, *6*, 1109 (1997).
- [7] Н. Ткач, А. Головацкий, М. Михалева, Р. Фартушинский. ФТТ 43, 7, 1315 (2001).
- [8] M. Tkach, A. Makhanets, G. Zegrya. Semicond. Sci. Tochpol. 15, 395 (2000).
- [9] M. Stroscio, M. Dutta. Biological nanostructures and applications of nanostructures in biology electrical, mechanical, and optical properties. Plenum Publ., N.Y. (2004). 192 p.
- [10] Xiaohu Gao, Yuanyuan Cui, R.M. Levenson, L.W.K. Chung, Shuming Nie. Nature Biotechnol. 22, 8, 969 (2004).
- [11] Г.Г. Зегря. Письма в ЖТФ 32, 4, 75 (2006).
- [12] Н.В. Ткач, В.А. Головацкий. ФТТ 41, 11, 2081 (1999).
- [13] Н.В. Ткач, В.А. Головацкий. ФТТ 43, 2, 350 (2001).
- [14] Н.В. Ткач, А.М. Маханец. ФТТ 47, 3, 550 (2005).
- [15] Н.В. Ткач, Ю.А. Сети. ФТП 40, 9, 1111 (2006).
- [16] Н.В. Ткач, Ю.А. Сети, Г.Г. Зегря. Письма в ЖТФ 33, 1, 70 (2007).
- [17] А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. Наука, М. (1971). 463 с.
- [18] D. Schooss, A. Mews, A. Eychmuller, H. Weller. Phys. Rev. B 49, 24, 17072 (1994).
- [19] A. Mews, A.V. Kadavanich, U. Banin, A.P. Alivisatos. Phys. Rev. B 53, 20, 13 242 (1996).