

Квазистационарные состояния электрона в сферической наногетеросистеме $\beta\text{-HgS}/\beta\text{-CdS}/\beta\text{-HgS}$

© Н.В. Ткач, В.А. Головацкий

Черновицкий государственный университет,
274012 Черновцы, Украина

(Поступила в Редакцию 12 марта 1999 г.)

Для сферической наногетеросистемы $\beta\text{-HgS}/\beta\text{-CdS}/\beta\text{-HgS}$ выполнен расчет матрицы рассеяния электрона для сферически симметричных состояний. Найдены и проанализированы положение энергетических уровней и время жизни электрона в соответствующих состояниях в зависимости от геометрических параметров системы.

Интерес к "искусственным атомам" — наногетеросистемам сложных сферических (и других) форм — обусловлен как возможностями их практического применения [1–2] (прецизионные по частоте лазеры, работающие при высоких температурах), так и возможностями исследования новых фундаментальных физических явлений.

Не так давно методом ионного замещения под давлением были экспериментально созданы сферически симметричные наногетеросистемы $\beta\text{-CdS}/\beta\text{-HgS}/\text{H}_2\text{O}$ и $\beta\text{-CdS}/\beta\text{-HgS}/\beta\text{-CdS}/\text{H}_2\text{O}$ [3–4]. В этих же работах экспериментально и теоретически исследовался спектр электронов и экситонов в зависимости от геометрических параметров системы. Теория электронного (дырочного) спектра в сложных сферических наногетеросистемах в приближении эффективной массы без учета взаимодействия с фононами представлена в работе [5]. В работах [6] учитывалось влияние поляризационных фононов (ограниченных и интерфейсных) на электронный, а в работе [7] — на экситонный спектры в сложных квантовых ямах.

Во всех этих и других работах соответствующая наногетеросистема явно или неявно предполагалась такой, что она помещена во внешнюю массивную среду, потенциал которой является наибольшим барьером для электрона или дырки. В результате в области энергий меньших высоты барьера внешней среды образуются связанные стационарные состояния электрона "искусственного атома", а в области энергий выше потенциального барьера — непрерывный спектр.

Насколько нам известно, пока не исследован спектр электрона в сферических наногетеросистемах другого типа, а именно таких, в которых внешняя среда является потенциальной ямой по отношению к сферической квантовой яме, отделенной от внешней среды потенциальным барьером. Из физических соображений ясно, что в такой наногетеросистеме должны возникать квазистационарные состояния электронов и дырок с конечным временем жизни этих квазичастиц. Поскольку экспериментальное создание подобных систем не вызывает принципиальных затруднений, а они могут иметь интересные практические применения, то представляет интерес исследовать электронные состояния в одной из таких систем.

В предлагаемой работе мы исследуем сферически симметричные квазистационарные состояния электрона в наногетеросистеме $\beta\text{-HgS}/\beta\text{-CdS}/\beta\text{-HgS}$, так как эта система, по-видимому, может быть создана экспериментально тем же методом ионного замещения, если внешний шар $\beta\text{-HgS}$ сделать столь толстым, чтобы его можно было рассматривать как внешнюю среду.

Будем изучать электронный спектр сферической наногетеросистемы, представляющей собой ядро $\beta\text{-HgS}$ (квантовая яма) и слой $\beta\text{-CdS}$ (потенциальный барьер), помещенные в массивную среду $\beta\text{-HgS}$. Геометрическая схема и потенциальная энергия электрона изображены на рис. 1. Потенциальная энергия электрона зависит лишь от расстояния до центра системы, поэтому уравнение Шредингера удобно решать в сферической системе координат с началом в центре гетеросистемы, где

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq R_0, r \geq R_1 \\ U, & R_0 < r < R_1 \end{cases}. \quad (1)$$

Эффективная масса электрона в каждой среде известна, и для системы в целом она может быть записана в виде

$$m(r) = \begin{cases} m_0, & r \leq R_0, r \geq R_1 \\ m_1, & R_0 < r < R_1 \end{cases}. \quad (2)$$

Уравнение Шредингера для электрона в рассматриваемой системе будет следующим:

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m(r)} \nabla - U(r) \right\} \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}). \quad (3)$$

С учетом сферической симметрии решение этого уравнения ищется в виде

$$\Psi(\mathbf{r}) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (4)$$

где $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — сферические функции, а радиальные функции $R(r)$, связанные с функциями $X(r)$ соотношением

$$R(r) = r X(r), \quad (5)$$

приводят к уравнению Бесселевого типа. В результате для сферически симметричных состояний ($l = 0$) одно

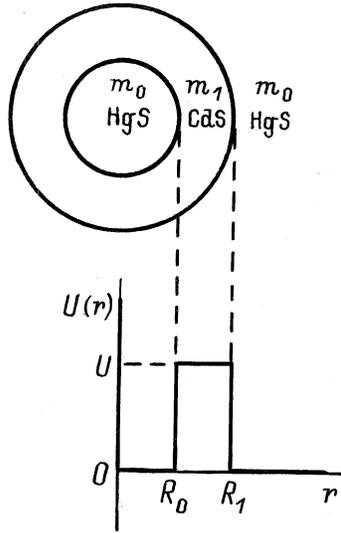


Рис. 1. Геометрическая схема и потенциал сложной сферической наногетеросистемы β -HgS/ β -CdS/ β -HgS.

из решений имеет вид

$$X_k^{(+)}(r) = \begin{cases} ae^{ikr} + be^{-ikr}, & r \leq R_0 \\ \alpha e^{\chi r} + \beta e^{-\chi r}, & R_0 < r < R_1, \\ e^{ikr}, & r \geq R_1 \end{cases} \quad (6)$$

где

$$\chi = \sqrt{\chi_0^2 - \frac{m_1}{m_0} k^2}, \quad \chi_0 = \sqrt{\frac{2m_1 U}{\hbar}}, \quad k = \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar}}.$$

Коэффициенты α, β, a, b определяются из условий непрерывности волновой функции и плотности потока вероятности на границах областей

$$\begin{aligned} \alpha &= e^{-R_1(\chi - ik)} \frac{\Delta m + g_1^+}{2m_0 R_1 \chi}, \quad \beta = -e^{R_1(\chi + ik)} \frac{\Delta m + g_1^-}{2m_0 R_1 \chi}, \\ a &= e^{(\chi + ik)\rho} \frac{e^{-2\rho\chi} (\Delta m + g_1^+) (-\Delta m + g_0^+) - (\Delta m + g_0^-) (-\Delta m + g_1^-)}{4im_0 m_1 R_0 R_1 k \chi}, \\ b &= -e^{ik(R_0 + R_1)\rho} \frac{e^{-2\rho\chi} (\Delta m + g_1^+) (-\Delta m + g_0^-) - (\Delta m + g_1^+) (-\Delta m + g_0^-)}{4im_0 m_1 R_0 R_1 k \chi}, \end{aligned} \quad (7)$$

где

$$\begin{aligned} \rho &= R_1 - R_0, \quad \Delta m = m_0 - m_1, \\ g_0^+ &= (m_0 \chi + ikm_1) R_0, \quad g_1^+ = (m_0 \chi + ikm_1) R_1, \\ g_0^- &= (m_0 \chi - ikm_1) R_0, \quad g_1^- = (m_0 \chi - ikm_1) R_1. \end{aligned}$$

Другое независимое решение $X_k^{(-)}(r)$ получается комплексным сопряжением

$$X_k^{(-)}(r) = X_k^{(+)*}(r), \quad (8)$$

поэтому общее решение имеет вид

$$X_k(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} S(k)^{-1/2} \frac{1}{2i} \left[-X_k^{(-)}(r) + S(k) X_k^{(+)}(r) \right], \quad (9)$$

где $S(k)$ — матрица рассеивания.

Аналитический расчет S -матрицы выполняется точно согласно модифицированной (на случай $m_1 \neq m_0$) общей теории [8]. Результат следующий:

$$S(k) = e^{-2ikR_1} \frac{g_1^- + \Delta m}{g_1^+ + \Delta m} \frac{e^{-2\chi\rho} + \frac{g_1^- - \Delta m}{g_1^+ + \Delta m} \xi(k)}{e^{-2\chi\rho} + \frac{g_1^- - \Delta m}{g_1^+ + \Delta m} \xi(k)}, \quad (10)$$

где

$$\xi(k) = \frac{m_1 k R_0 \operatorname{ctg}(kR_0) + m_0 R_0 \chi + \Delta m}{m_1 k R_0 \operatorname{ctg}(kR_0) - m_0 R_0 \chi + \Delta m}. \quad (11)$$

Полюса S -матрицы в нижней комплексной полуплоскости ($k = k_1 - ik_2$) определяют спектр энергий (E_n) и время жизни (τ_n) электрона в квазистационарных состояниях. Эти величины можно вычислить численными методами. В связи с большой разницей в порядках величин k_1 и k_2 (6–10 порядков) точность вычисления величины τ_n может быть недостаточной, особенно при больших значениях ширины и высоты потенциального барьера. Поэтому проанализируем выражение (10). В случае, когда $\chi\rho \gg 1$ (барьер достаточно широкий и высокий), слагаемым $\exp(-2\chi\rho)$ можно пренебречь везде, кроме точки $k = k_n$, где $\xi(k) = 0$. Следовательно, (10) будет иметь вид функции

$$S(k) = e^{-2ikR_1} \frac{m_0 \chi - (m_0 - m_1)/R_0 + ikm_1}{m_0 \chi - (m_0 - m_1)/R_1 - ikm_1}, \quad (12)$$

не имеющий полюсов. Таким образом, полюса S -матрицы возможны только в окрестности точек $k = k_n$. Значение k_n , являющееся решением дисперсионного уравнения

$$m_1 k R_0 \operatorname{ctg}(kR_0) + m_0 R_0 \chi + \Delta m = 0, \quad (13)$$

определяет энергии стационарных состояний электрона в предельном случае $\rho \rightarrow \infty$. Для определения аналитических выражений приближенных значений k_1 и k_2 в уравнении

$$e^{-2\chi\rho} + \frac{g_1^- - \Delta m}{g_1^+ + \Delta m} \xi(k) = 0, \quad (14)$$

которое определяет полюса S -матрицы (8), разложим $\xi(k)$ в ряд по степеням $(k - k_n)$, сохраняя линейное слагаемое

$$\begin{aligned} \xi(k) &= \frac{(k - k_n)}{2k_n} (1 + R_0 \chi_n) \\ &\times \left(\frac{m_1 k_n^2}{m_0 \chi_n^2} + \frac{m_0 - m_1}{m_1 R_0 \chi_n} + \frac{m_0}{m_1} \right), \end{aligned} \quad (15)$$

где $\chi_n = \sqrt{\chi_0^2 - \frac{m_1}{m_0} k_n^2}$.

Подставляя теперь (15) в (14), получим приближенные значения k_1 и k_2 , а следовательно, и энергии квазистационарных состояний

$$E_n = \frac{2\hbar^2}{m_0} (k_1^2 - k_2^2) \approx \frac{2\hbar^2}{m_0} k_n^2, \quad (16)$$

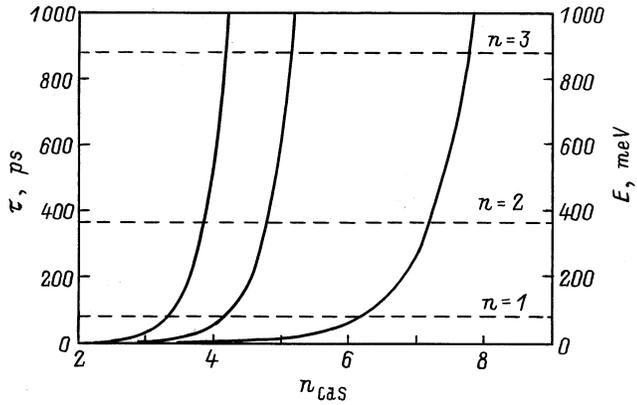


Рис. 2. Зависимости E_n (штриховые линии) и τ_n (сплошные линии) от ширины потенциального барьера $n_{CdS} = \rho/a_{CdS}$.

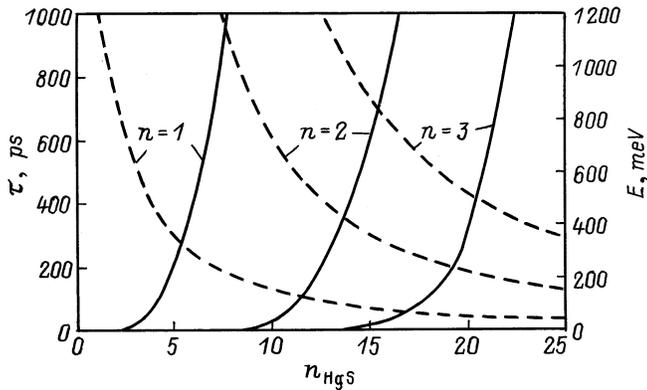


Рис. 3. Зависимости E_n (штриховые линии) и τ_n (сплошные линии) от ширины потенциальной ямы $n_{HgS} = R_0/a_{HgS}$.

и времена жизни электрона в этих состояниях

$$\tau_n = \frac{m_0}{2\hbar^2 k_1 k_2} \approx \frac{\hbar e^2 \chi_n \rho}{16 E_n} \times \frac{[m_1^2 k_n^2 + (m_0 \chi_n + \frac{\Delta m}{R_1})^2] (m_0^2 \chi_n^2 + m_1^2 k_n^2 + m_0 \Delta m \frac{\chi_n}{R_1}) (\chi_n R_0 + 1)}{m_1^2 \chi_n^3 k_n}. \quad (17)$$

Конкретный расчет характеристик электронного спектра выполняется для наногетеросистемы β -HgS/ β -CdS/ β -HgS с параметрами $m_0 = 0.036m_e$, $m_1 = 0.2m_e$, $U = 1.2 \text{ eV}$, $a_{HgS} = 5.851 \text{ \AA}$, $a_{CdS} = 5.818 \text{ \AA}$. Результаты расчета зависимостей E_n и τ_n первых трех уровней от ширины барьера (β -CdS) при фиксированной ширине ямы β -HgS $R_0 = 15a_{HgS}$ приведены на рис. 2. Расчет выполняется как согласно точной формуле (10), так и по приближенным формулам (16)–(17). Отклонение в полученных результатах не превышает 1% даже при минимальной ширине барьера. Как видно из рисунка, все уровни энергий практически не зависят от ширины барьера, а время жизни электрона в этих состояниях экспоненциально увеличивается с увеличением ρ .

На рис. 3 приведены зависимости E_n и τ_n от ширины ямы R_0 при фиксированной ширине барьера $\rho = 5a_{CdS}$. Из рис. 3 видно, что с увеличением ρ все уровни энергии смещаются по квадратичному закону в область меньших энергий, а время жизни электрона в этих состояниях быстро увеличивается с увеличением ширины ямы. Последнее понятно из физических соображений, так как увеличение ширины ямы понижает энергетический уровень, чем увеличивает "мощность" барьера, т. е. препятствует выходу электрона в область свободного пространства из связанного состояния, увеличивая тем самым время жизни в этом состоянии.

Таким образом, можно заключить, что в сферических наногетеросистемах с квазистационарными состояниями время жизни электрона очень чувствительно к геометрическим характеристикам наносистемы.

Список литературы

- [1] Ж.И. Алфёров. ФТП **32**, 3 (1998).
- [2] Н.Н. Леденцов, В.М. Устинов, В.А. Шукин, П.С. Копьев, Ж.И. Алфёров, Д. Бимберг. ФТП **32**, 385 (1998).
- [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, V. Holowatsky, O. Voitsekhivska, M. Min'kova. Phys. Stat. Sol. **203**, 578 (1997).
- [8] А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов. Рассеяния, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. Наука, М. (1971). 463 с.