

Спектры электронов и дырок в сверхрешетке цилиндрических квантовых проволок

© В.Н. Головач, Г.Г. Зегря, А.М. Маханец*, И.В. Пронишин*, Н.В. Ткач*

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

*Черновицкий государственный университет,
274012 Черновцы, Украина

(Получена 15 июля 1998 г. Принята к печати 3 ноября 1998 г.)

В рамках метода присоединенных плоских волн рассчитаны спектры электронов и дырок в сверхрешетке цилиндрических квантовых проволок. Составляющая энергии, обусловленная движением квазичастиц в направлении, перпендикулярном аксиальной оси проволоки, представляет собой чередование зон с положительной и отрицательной эффективной массой. Учет потенциала сверхрешетки квантовых проволок приводит к снятию вырождения по магнитному квантовому числу при отходе от точки Γ зоны Бриллюэна. Исследованы зависимости энергий основных зон от радиуса квантовых проволок и от расстояния между проволоками для плоского движения квазичастиц.

За последние годы полупроводниковые гетероструктуры с успехом используются в опто- и микроэлектронике. Современная технология позволяет создавать полупроводниковые гетероструктуры с квантовыми ямами, квантовыми нитями и квантовыми точками. Для прогнозирования характеристик приборов, а также для создания новых приборов необходим микроскопический подход к анализу энергетических спектров носителей заряда в указанных гетероструктурах.

Интересным объектом исследования представляется гетероструктура, состоящая из квантовых проволок (КП) одного материала, находящихся в другом материале и образующих сверхрешетку в плоскости, перпендикулярной к аксиальной оси КП. Если длина КП L значительно превышает длину свободного пробега квазичастицы, то КП можно считать бесконечно длинной; при этом радиус КП и расстояние между ближайшими соседями будут считаться много меньшими L . Понятно, что пространственное изменение размеров и расположения КП должно приводить к изменению электронных, дырочных и экситонных спектров в такой сверхрешетке.

Цель работы состоит в теоретическом исследовании спектров электронов и дырок и их волновых функций для сверхрешетки цилиндрических квантовых проволок (СЦКП).

1. Спектр электрона (дырки) в СЦКП

Исследуем систему, состоящую из цилиндрических КП (материал 1), периодически расположенных в среде (материал 2). Плоское сечение системы изображено на рис. 1. Далее, для конкретности, будем предполагать, что в цилиндрической системе координат с осью Oz вдоль аксиальной оси одной из КП потенциальная энергия и эффективная масса электрона различны в разных средах.

Чтобы найти спектр и волновые функции электрона, необходимо решить уравнение Шредингера с гамильтонианом, который в цилиндрической системе координат

имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\nabla_{\rho\varphi} \frac{1}{\mu(\rho, \varphi)} \nabla_{\rho\varphi} + \frac{1}{\mu(\rho, \varphi)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(\rho), \quad (1)$$

$$\hat{H}\Psi(\rho, \varphi, z) = E\Psi(\rho, \varphi, z). \quad (2)$$

Представим $\Psi(\rho, \varphi, z)$ в виде

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = \frac{1}{\sqrt{L}} \psi(\rho) e^{ik_{\parallel}z}, \quad (3)$$

где L — длина основной области вдоль оси КП. Подставляя (3) в (2), для $\psi(\rho)$ получаем уравнение

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{1}{\mu(\rho, \varphi)} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2 \mu(\rho, \varphi)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + U(\rho, \varphi) \right] \psi(\rho) = \left(E - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2\mu(\rho, \varphi)} \right) \psi(\rho). \quad (4)$$

Уравнение (4) можно решить методом присоединенных плоских волн (ППВ), который хорошо известен для трехмерных систем [1]. Модификация метода ППВ на случай исследуемой нами плоской системы выполняется следующим образом.

Будем считать, что в плоскости $xу$ квантовые проволоки образуют квадратную решетку с периодом $d = 2\rho_0 + b$, где ρ_0 — радиус поперечного сечения нити, а b — толщина барьерной области между соседними КП (рис. 1). Расположим начало координат в центре круга радиуса ρ_0 , совпадающего с узлом решетки. В пределах одной ячейки Вигнера–Зейтца так называемый "m-t потенциал" и эффективная масса имеют простой вид

$$U(\rho) = \begin{cases} -U_0 & \text{при } \rho \leq \rho_0, \\ 0 & \text{при } \rho > \rho_0. \end{cases} \quad (5)$$

$$\mu(\rho) = \begin{cases} \mu_1 & \text{при } \rho \leq \rho_0, \\ \mu_2 & \text{при } \rho > \rho_0. \end{cases} \quad (6)$$

Используя метод ППВ [1], будем точно решать уравнение Шредингера для области плоского пространства внутри квантовых ям, где волновая функция может быть представлена в виде суперпозиции цилиндрических гармоник. В области вне ям пробную волновую функцию можно выбрать в виде плоской волны, которая может быть разложена по цилиндрическим гармоникам. Коэффициенты разложения находятся из условия непрерывности функций на границе круга радиуса ρ_0 . Таким образом, пробная волновая функция в виде присоединенной плоской волны (ППВ) может быть представлена в следующем виде:

$$\Phi_{\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}}(\boldsymbol{\rho}) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\Omega_0}} \sum_{-\infty}^{\infty} i^m \frac{J_m(|\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}| \rho_0)}{J_m(\chi \rho_0)} J_m(\chi \rho) \\ \quad \times \exp[i m(\varphi - \varphi_{\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}})], & \rho \leq \rho_0, \\ \frac{1}{\sqrt{\Omega_0}} \exp[i(\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g})\boldsymbol{\rho}] = \frac{1}{\sqrt{\Omega_0}} \sum_{-\infty}^{\infty} i^m J_m(|\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}|(\rho)) \\ \quad \times \exp[i m(\varphi - \varphi_{\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}})], & \rho > \rho_0, \end{cases} \quad (7)$$

где $\Omega_0 = (2\rho_0 + b)^2$ — объем элементарной ячейки, J_m — цилиндрические функции Бесселя, m — магнитное квантовое число, \mathbf{k}_\perp — волновой вектор квазичастицы (соответствующий движению в плоскости xy), \mathbf{g} — вектор двумерной обратной решетки, $|\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}|$ и $\varphi_{\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}}$ — полярные координаты вектора $\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}$,

$$\chi = \hbar^{-1} \sqrt{2\mu_1 \left(U_0 - E + \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2\mu_1} \right)}.$$

Присоединенная плоская волна (7) удовлетворяет условию периодичности Блоха, но еще не удовлетворяет уравнению Шредингера с потенциалом сверхрешетки, поскольку до сих пор не предполагалась связь между энергией и волновым вектором. Чтобы найти эту связь, согласно теореме Блоха, будем искать волновую функцию квазичастицы в виде линейной комбинации присоединенных плоских волн

$$\psi_{\mathbf{k}_\perp}(\boldsymbol{\rho}) = \sum_{\mathbf{g}} c_{\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}} \Phi_{\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}}(\boldsymbol{\rho}), \quad (8)$$

где суммирование ведется по векторам обратной решетки, а коэффициенты $c_{\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}}$ подлежат определению.

Поскольку всякая ППВ имеет разрыв производной на границе между квантовыми ямами и межъямными областями, для решения задачи лучше использовать не уравнение Шредингера, а эквивалентный ему вариационный

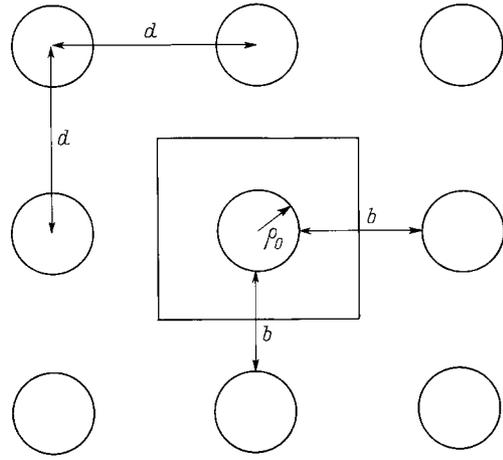


Рис. 1. Геометрия сверхрешетки из цилиндрических квантовых проволок.

принцип. Определим функционал энергии на волновых функциях (8) в виде

$$\Lambda = \int_{\Omega_0} \left\{ \frac{\hbar^2}{2} \nabla_{\rho, \varphi} \psi_{\mathbf{k}_\perp}^* \frac{1}{\mu(\rho, \varphi)} \nabla_{\rho, \varphi} \psi_{\mathbf{k}_\perp} + \left(U(\rho) - E + \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2\mu(\rho, \varphi)} \right) \psi_{\mathbf{k}_\perp}^* \psi_{\mathbf{k}_\perp} \right\} d\rho. \quad (9)$$

Минимизация функционала Λ по $c_{\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}}$ приводит к системе уравнений

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2\mu_2} (\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g})^2 - E + \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2\mu_2} \right\} c_{\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}} + \sum_{\mathbf{g}'} \Gamma_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} c_{\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}'} = 0, \quad (10)$$

где $\Gamma_{\mathbf{g}\mathbf{g}'}$ — интеграл, содержащий функции $\Phi_{\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}}$, функции $\Phi_{\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}'}$ и гамильтониан с периодическим потенциалом системы. Производя интегрирование в $\Gamma_{\mathbf{g}\mathbf{g}'}$ по объему элементарной ячейки Ω_0 , в результате получим

$$\Gamma_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} = \frac{2\pi\rho_0}{\Omega_0} \left\{ - \left[\frac{\hbar^2}{2\mu_2} (\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g})(\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}') - E + \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2\mu_2} \right] \times \frac{J_1(|\mathbf{g} - \mathbf{g}'| \rho_0)}{|\mathbf{g} - \mathbf{g}'|} + \frac{\hbar^2}{2\mu_1} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \exp[i m \varphi_{\mathbf{g}\mathbf{g}'}] J_m(|\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}| \rho_0) \times J_m(|\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}'| \rho_0) \left[\frac{d}{d\rho} \ln J_m(\chi \rho) \right]_{\rho=\rho_0} \right\}, \quad (11)$$

где $\varphi_{\mathbf{g}\mathbf{g}'}$ — угол между векторами $(\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g})$ и $(\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}')$. Первое слагаемое в правой части (11) происходит от областей вне квантовых ям, остальные слагаемые воз-

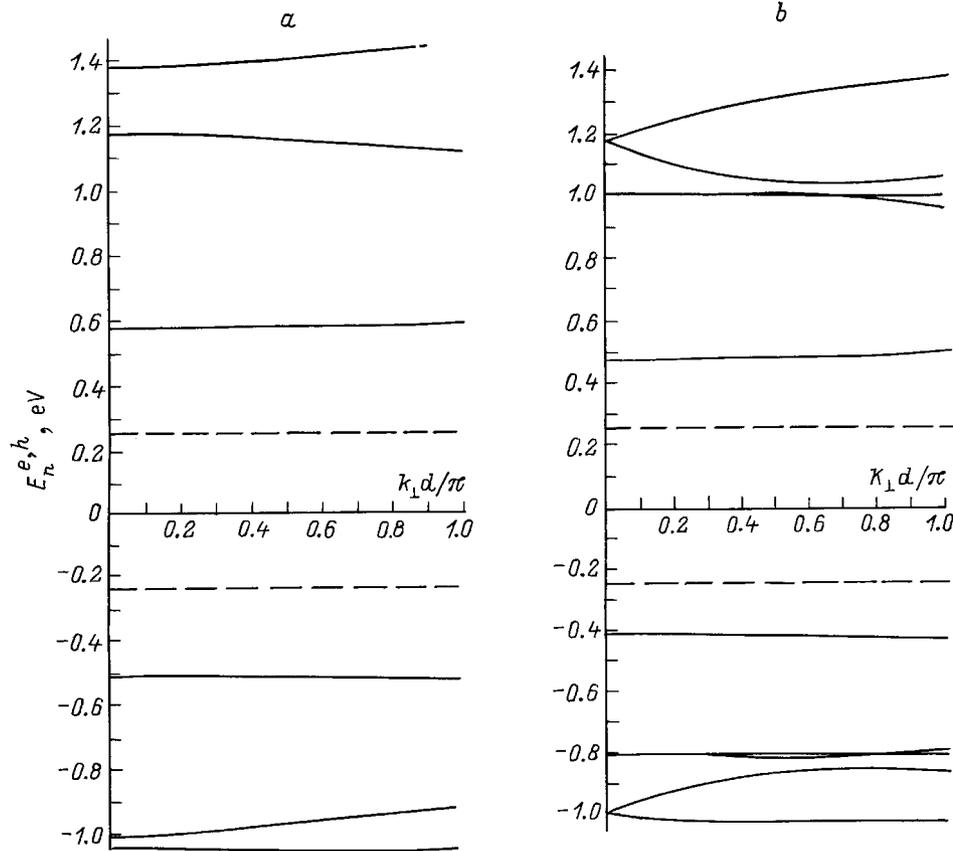


Рис. 2. Закон дисперсии электрона и дырки в сверхрешетке из цилиндрических квантовых проволок при $\rho_0 = 7a_{\text{HgS}}$ и $b = 14a_{\text{CdS}}$. Штриховыми прямыми обозначены дно зоны проводимости и потолок валентной зоны HgS. Расчет выполнен при учете: *a* — одного узла обратной решетки ($g = 0$); *b* — первого координационного круга.

никают из-за действия оператора градиента на присоединенные плоские волны. Величины $\Gamma_{gg'}$ суть фурье-компоненты эффективного потенциала сверхрешетки из квантовых ям.

Условие нетривиальности решения системы (10) приводит к секулярному уравнению

$$\det \left[\left[\frac{\hbar^2}{2\mu_2} (\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g})^2 - E + \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2\mu_2} \right] \delta_{gg'} + \Gamma_{gg'} \right] = 0, \quad (12)$$

из которого определяется энергетический спектр квазичастицы $E_n(\mathbf{k}_\perp, k_\parallel)$, $n = 1, 2, \dots, \tau$. Из условия нормировки

$$\sum_{gg'} c_{\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}}^* c_{\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}'} (\mathbf{P}_{gg'} + \mathbf{S}_{gg'}) = 1, \quad (13)$$

где величины

$$\mathbf{P}_{gg'} = \delta_{gg'} - \frac{2\pi\rho_0}{\Omega_0} \frac{J_1(|\mathbf{g} - \mathbf{g}'|\rho_0)}{|\mathbf{g} - \mathbf{g}'|}, \quad (14)$$

$$\mathbf{S}_{gg'} = \frac{\pi\rho_0^2}{\Omega_0} \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(|\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}|\rho_0) J_m(|\mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}'|\rho_0) \times \frac{J_m^2(\chi\rho_0) - J_{m-1}(\chi\rho_0) J_{m+1}(\chi\rho_0)}{J_m^2(\chi\rho_0)}, \quad (15)$$

и системы уравнений (10) однозначно находятся коэффициенты $c_{n, \mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}}$ и, таким образом, определяются волновые функции

$$\psi_n(\rho, z) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_\parallel z} \sum_{\mathbf{g}} c_{n, \mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}} \Phi_{n, \mathbf{k}_\perp - \mathbf{g}}(\rho). \quad (16)$$

2. Спектры электрона и дырки в сверхрешетке квантовых проволок из β -HgS в матрице β -CdS

Развитая в предыдущем параграфе теория применяется для расчета спектра электрона и дырки в квадратной сверхрешетке, образованной квантовыми проволоками из β -HgS, внедренными в кристалл β -CdS. Выбор системы обусловлен тем, что оба кристалла имеют очень близкие постоянные решетки (см. таблицу) и граница

	U_0^e , эВ	U_0^h , эВ	E_g , эВ	μ^e/μ_0	μ^h/μ_0	a , Å
β -HgS	1.2	-0.8	0.5	0.036	0.044	5.851
β -CdS	0	0	2.5	0.2	0.7	5.818

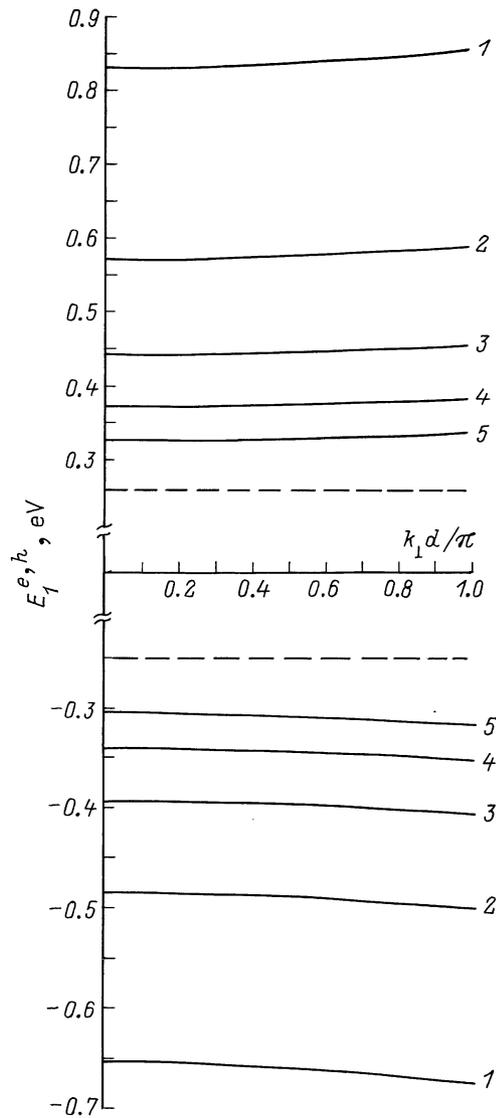


Рис. 3. Закон дисперсии основной зоны квазичастиц в сверхрешетке из цилиндрических квантовых проволок при $b = 16a_{\text{CdS}}$ для отношений радиуса ямы ρ_0 к постоянной решетки HgS ρ_0/a_{HgS} : 1 — 4, 2 — 6, 3 — 8, 4 — 10, 5 — 12. Штриховые прямые — то же, что и на рис. 2.

между ними весьма четкая (без переходной области), как в случае экспериментально реализованных сложных квантовых ям [12].

Основное внимание уделяется численному расчету зависимостей энергетических спектров электрона и дырки $E_n^{e,h}(\mathbf{k}_\perp, k_\parallel)$, соответствующих их движению в плоскости, перпендикулярной оси КП, так что можно положить $k_\parallel = 0$.

Расчет $E_n(\mathbf{k}_\perp)$ выполнялся для системы с параметрами, указанными в таблице. На рис. 2, *a, b* в качестве примера приведен спектр электрона и дырки. При этом спектр на рис. 2, *a* отвечает учету только одного узла обратной решетки ($\mathbf{g} = 0$), а спектр на рис. 2, *b* рассчитан

при учете первого координационного круга. Заметим, что разница в спектрах, рассчитанных при учете первого и второго координационных кругов, столь мала, что в масштабе рис. 2, *b* она не заметна, т. е. сходимость метода ППВ в данном случае весьма хорошая. Энергия $E_n^{e,h}(\mathbf{k}_\perp)$ для удобства отсчитывается от середины запрещенной зоны β -HgS. Дно зоны проводимости и потолок валентной зоны кристалла-ямы β -HgS изображены штриховыми линиями.

Из рис. 2 видно, что учет $\mathbf{g} \neq 0$ приводит к значительному (порядка сотен мэВ) сдвигу всех энергетических зон к началу отсчета энергии и к расщеплению всех (кроме основной) зон на две. При этом, чем выше электронная зона (ниже дырочная), тем больше ее ширина. Поведение зон вполне соответствует физическим соображениям, так как учет ненулевых компонент вектора \mathbf{g} эквивалентен учету кристаллического потенциала, который, с одной стороны, понижает абсолютное значение величины энергий квазичастиц, а с другой — приводит к снятию вырождения по квантовому числу m

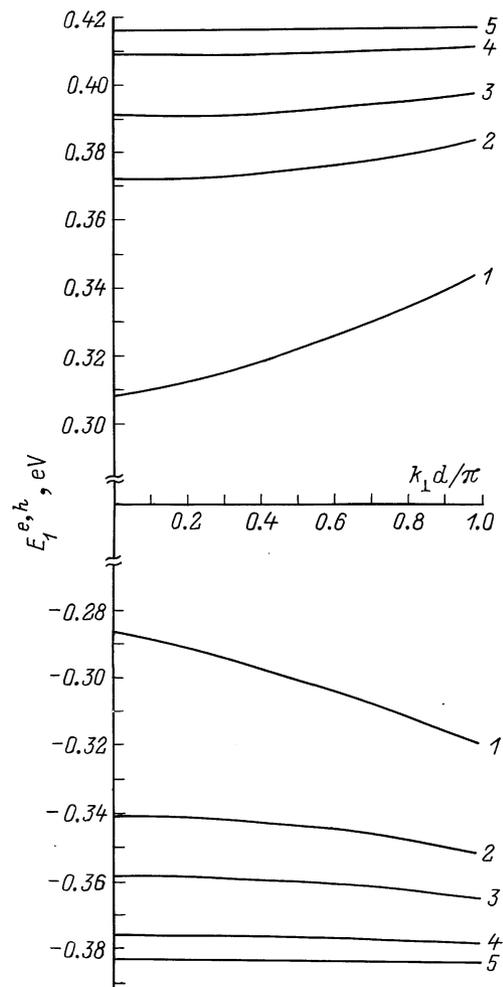


Рис. 4. Закон дисперсии основной зоны квазичастиц в сверхрешетке из цилиндрических квантовых проволок при $\rho_0 = 10a_{\text{HgS}}$ для расстояний между ямами b , соответствующих отношению b/a_{CdS} : 1 — 12, 2 — 16, 3 — 20, 4 — 30, 5 — 40.

(при $k_{\perp} \neq 0$). Увеличение ширины зон, отвечающих возбужденным состояниям квазичастиц, обусловлено тем, что квазичастицы с большей энергией легче туннелируют сквозь потенциальные барьеры среды (CdS) между квантовыми ямами (HgS).

На рис. 3 приведены основные зоны энергетического спектра электрона и дырки, рассчитанные при различных значениях радиуса КП, но при фиксированной толщине барьера. Из рисунка видно, что ширины зон практически не чувствительны к изменению радиуса, но их положение очень сильно (на сотни мэВ) смещается в область меньших абсолютных величин энергий при увеличении радиуса КП.

На рис. 4 приведены результаты расчета зависимостей $E_1^e(k_{\perp})$ и $E_1^h(k_{\perp})$ при фиксированном радиусе КП, но при разных толщинах барьера. Из рисунка видно, что с уменьшением толщины барьера обе зоны значительно (до сотни мэВ) сдвигаются в сторону меньших абсолютных значений энергии. При этом их ширины увеличиваются в десятки раз, что эквивалентно уменьшению соответствующей компоненты эффективной массы (μ_{\perp}).

Таким образом, развитая теория спектра электронов и дырок в сверхрешетке квантовых проволок показывает, что путем изменения пространственных размеров сверхрешетки квантовых проволок можно целенаправленно управлять фундаментальными характеристиками квазичастиц в весьма широких пределах.

Работа частично была поддержана Российским Фондом фундаментальных исследований (гранты 97-02-18151, 98-07-90336, 99-02-16796) и Государственной программой: физика твердотельных наноструктур (гранты 97-1035, 97-0003).

Список литературы

- [1] И.М. Цидильковский. *Электроны и дырки в полупроводниках* (М., Наука, 1972).
- [2] D. Schoos, A. Mews, A. Eychmuller, H. Weller. Phys. Rev. B, **49** (24) 17 072 (1994).

Редактор Т.А. Полянская

Electron and hole spectra peculiar to the superlattice of cylindrical quantum wires

V.N. Golovach, G.G. Zegrya, A.M. Makhanets*,
I.V. Pronishin*, N.V. Tkach*

A.F. Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

* The Chernovtsy State University,
274012 Chernovtsy, the Ukraine