

Свойства электронного спектра в двухъямной закрытой сферической квантовой точке и его эволюция при изменении толщины внешней ямы

© Н.В. Ткач[¶], Ю.А. Сети

Черновицкий национальный университет,
58012 Черновцы, Украина

(Получена 10 января 2006 г. Принята к печати 30 января 2006 г.)

Развита теория электронного спектра трехшаровой двухъямной закрытой сферической квантовой точки и исследована его эволюция при изменении толщины внешней шаровой ямы от нуля (стационарный спектр простой закрытой сферической квантовой точки) до бесконечности (квазистационарный спектр простой открытой сферической квантовой точки). Впервые показан механизм возникновения затухания электронных состояний в закрытой двухъямной сферической квантовой точке из-за увеличения толщины ее внешней шаровой ямы. Установлено, что физической причиной превращения стационарного спектра в квазистационарный является перераспределение вероятностей пребывания возбужденного в резонансное состояние сферической квантовой точки электрона в энергетических состояниях квазистационарной полосы во всем пространстве наносистемы. Показано, что двухъямная закрытая сферическая квантовая точка с достаточно большой толщиной внешней ямы с любой необходимой точностью воспроизводит основные свойства электрона в простой открытой сферической квантовой точке. Развитый подход, в котором был использован математический аппарат квантовой теории поля (метод функций Грина), может быть положен в основу создания отсутствующей пока теории квазистационарных спектров и теории взаимодействия квазичастиц (электроны, дырки) как между собой (экситон), так и с квантованными полями (фононы) в многослойных открытых наносистемах.

PACS: 71.15.Dx, 73.21.La

1. Введение

Современные экспериментальные возможности создания многослойных наногетеросистем (в частности, метод ионного замещения) позволяют получать и исследовать как закрытые, так и открытые квантовые точки [1–3]. Важной особенностью открытых систем по сравнению с закрытыми является возможность управления дополнительным каналом релаксации энергии квазичастиц из-за их ухода из квантовой точки в открытое пространство внешней среды. Это позволяет создавать сверхбыстродействующие датчики излучений в необходимой области спектра путем соответствующего подбора геометрических и физических параметров многослойных открытых квантовых точек.

Теория спектров и волновых функций электронов и дырок в простых и многослойных сферических квантовых точках (СКТ), находящихся во внешней среде, построена как для закрытых (close) [2–5], так и для открытых (open) [6–8] наногетеросистем. Что же касается теории экситонов или теории взаимодействия электронов, дырок и экситонов с фононами в закрытых СКТ, то она достаточно хорошо развита на базе разных моделей фононной подсистемы (в основном это модель диэлектрического континуума) для закрытых систем [9–11]. Результаты теории удовлетворительно соответствуют эксперименту [2,3].

Математический аппарат квантовой механики [12] и методы вторичного квантования с использованием теории функций Грина [13] в задачах о взаимодействии

квазичастиц с квантованными полями (фононами) хорошо работают для закрытых систем. Но они не находят непосредственного применения в случае открытых систем с квазистационарными состояниями, в которых квазичастицы имеют конечное время жизни.

В работах [6,8] была развита электронная (дырочная) теория для открытых СКТ на основе S -матрицы рассеяния, но обобщить ее на случай экситона как системы взаимодействующих электрона и дырки не удастся из-за математических затруднений, возникающих при попытке точного решения уравнения Шредингера для системы двух взаимодействующих квазичастиц.

Отсутствует и теория электрон-фононного и экситон-фононного взаимодействий в открытых СКТ, так как волновые функции этих квазичастиц в квазистационарных состояниях не входят в полную систему нормированных функций [12]. Это не позволяет воспользоваться методами квантовой теории поля при исследовании спектров, перенормированных взаимодействием.

Обойти принципиальные теоретические затруднения при исследовании простой открытой СКТ можно путем изучения соответствующей закрытой СКТ с очень большой толщиной внешней шаровой ямы (Δ_2). Однако в таком случае возникает существенный вопрос — при каких толщинах Δ_2 для закрытой СКТ электронный спектр и волновые функции можно считать близкими (и с какой точностью) к тем, которые соответствуют открытой системе. Здесь возникает парадокс, который, насколько нам известно, пока не получил разрешения в литературе. Суть парадокса в том, что в простой открытой СКТ спектр электрона должен быть квази-

[¶] E-mail: theorphys@chnu.cv.ua

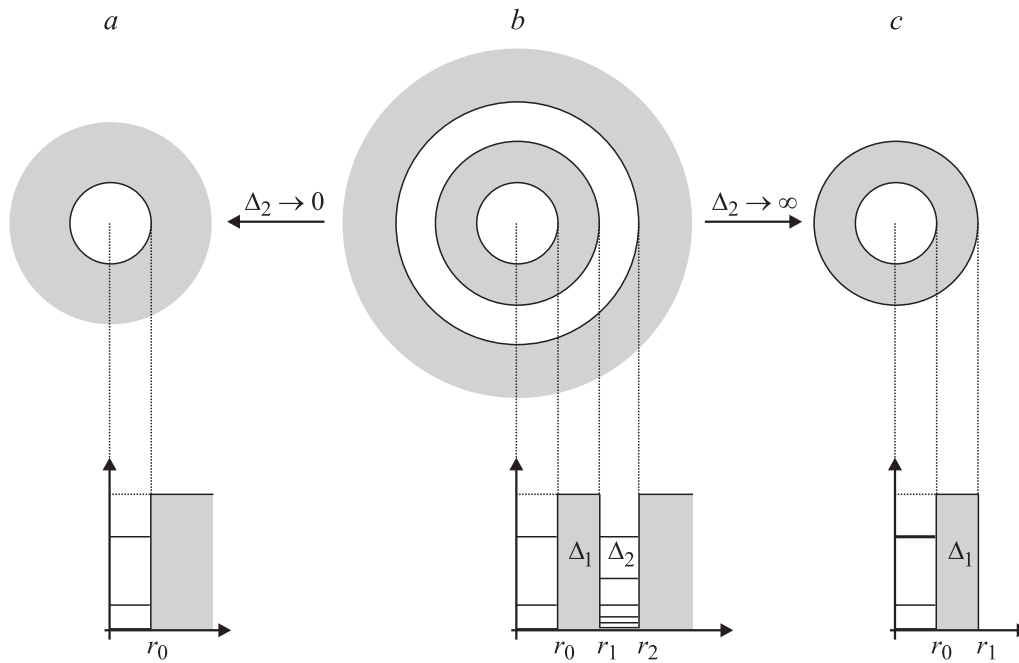


Рис. 1. Геометрические и энергетические схемы простой закрытой (а), двухъямной трехшаровой закрытой (b) и простой открытой (c) сферических квантовых точек.

стационарным, тогда как в трехслойной двухъямной закрытой СКТ он, на первый взгляд, является стационарным независимо от толщины внешней ямы Δ_2 . Как будет показано в данной работе, разрешение парадокса заключается в том, что по мере увеличения толщины Δ_2 для двухъямной закрытой СКТ электронные состояния системы перестают быть стационарными и при $\Delta_2 \rightarrow \infty$ спектр постепенно превращается в квазистационарный.

Цель предлагаемой работы заключается в том, чтобы исследовать эволюцию спектра и плотности вероятности нахождения электрона в двухъямной закрытой СКТ в зависимости от толщины внешней шаровой ямы. При этом будет получен спектр и волновые функции электрона в двухъямной закрытой СКТ, которая при $\Delta_2 \rightarrow \infty$ переходит в простую открытую СКТ. Впервые будет выявлена физическая причина конечности времени жизни электрона в квазистационарном состоянии в результате перераспределения вероятности нахождения электрона, возбужденного в резонансное состояние СКТ, по всем состояниям квазистационарной полосы, которые принадлежат всей наногетеросистеме (как сферической квантовой точке, так и внешней среде).

2. Гамильтониан, спектр и волновые функции электрона в двухъямной закрытой СКТ

Будем изучать энергетический спектр и волновые функции электрона в трехшаровой закрытой СКТ с двумя потенциальными ямами и одним барьером. Геометрические параметры задачи — радиус внутренней

шаровой ямы r_0 , толщина шарового барьера Δ_1 и толщина внешней шаровой ямы Δ_2 — указаны на рис. 1, b. Из рис. 1 видно, что при $\Delta_2 \rightarrow 0$ трехшаровая наносистема переходит в простую закрытую СКТ (рис. 1, a), а при $\Delta_2 \rightarrow \infty$ она переходит в простую открытую двухшаровую СКТ (рис. 1, c). На рис. 1 показаны и уровни потенциальной энергии электрона в соответствующих наногетеросистемах.

Чтобы найти спектр и волновые функции электрона в трехшаровой закрытой СКТ, необходимо решить стационарное уравнение Шредингера [12]

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

В сферической системе координат с началом в центре СКТ электрон характеризуется эффективной массой

$$m(r) = \begin{cases} m_0, & r < r_0, & r_1 < r < r_2 \\ m_1, & r_0 \leq r \leq r_1, & r_2 \leq r < \infty \end{cases} \quad (2)$$

и потенциальной энергией

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r < r_0, & r_1 < r < r_2 \\ U, & r_0 \leq r \leq r_1, & r_2 \leq r < \infty. \end{cases} \quad (3)$$

С учетом сферической симметрии решение уравнения (1) может быть представлено в следующем виде:

$$\Psi_{\ell m}(\mathbf{r}) = R_{\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \varphi),$$

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (4)$$

где $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ — сферическая функция. Для радиальных функций $R_\ell(r)$, представленных в виде

$$R_\ell(r) = R_\ell^{(0)}(r)\theta(r_0 - r) + \sum_{i=1}^2 R_\ell^{(i)}(r)[\theta(r_i - r) - \theta(r - r_{i-1})] + R_\ell^{(3)}(r)\theta(r - r_2), \quad (5)$$

где $\theta(r_i - r)$ — функция Хевисайда, получается система уравнений

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + K_i^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right\} R_\ell^{(i)}(r) = 0, \quad i = 0, 1, 2, 3. \quad (6)$$

Решения этой системы — функции $R_\ell^{(i)}(r)$ — находятся в виде линейных комбинаций функций Бесселя и Неймана:

$$R_\ell^{(i)}(K_i r) = A_\ell^{(i)} J_\ell(K_i r) + B_\ell^{(i)} N_\ell(K_i r), \quad (7)$$

где $A_\ell^{(i)}, B_\ell^{(i)}$ — коэффициенты,

$$J_\ell(K_i r) = \begin{cases} j_\ell(k_i r), & U_i \geq E \\ h_\ell^+(i\chi_i r), & U_i < E, \end{cases}$$

$$N_\ell(K_i r) = \begin{cases} n_\ell(k_i r), & U_i \leq E \\ h_\ell^-(i\chi_i r), & U_i < E, \end{cases}$$

$$K_i^2 = \frac{2m_i}{\hbar} (E - U_i) = \begin{cases} k_i^2, & i = 0, 2 \\ -\chi_i^2, & i = 1, 3. \end{cases} \quad (9)$$

Условия непрерывности радиальных волновых функций и потоков их плотностей на всех границах разделов между шаровыми слоями системы

$$\left. \begin{aligned} R_\ell^{(i)}(r) \Big|_{r=r_i} &= R_\ell^{(i+1)}(r) \Big|_{r=r_i} \\ \frac{1}{m} \frac{dR_\ell^{(i)}(r)}{dr} \Big|_{r=r_i} &= \frac{1}{m_{i+1}} \frac{dR_\ell^{(i+1)}(r)}{dr} \Big|_{r=r_i} \end{aligned} \right\}, \quad i = 0, 1, 2, 3 \quad (10)$$

совместно с условием нормировки

$$\int_0^\infty |R_\ell(r)|^2 r^2 dr = 1 \quad (11)$$

однозначно определяют все коэффициенты $A_\ell^{(i)}, B_\ell^{(i)}$, а следовательно, и весь полный набор радиальных волновых функций ($R_\ell^{(i)}(r)$) и энергетический спектр ($E_{n\ell}$) электрона в связанных состояниях ($E < U$), которые будут изучаться в дальнейшем. Не приводя здесь громоздкие явные выражения для радиальных функций ($R_\ell^{(i)}(r)$), запишем только дисперсионное уравнение

$$\frac{1}{m_0^3 m_1^3 r_0 r_1 r_2} \left\{ J_\ell(kr_0) [P_\ell n_\ell - T_\ell^{(1)} L_\ell(\chi r_2)] + km_1 r_0 J_{\ell+1}(kr_0) [P_\ell \vartheta_\ell + T_\ell^{(2)} L_\ell(\chi r_2)] \right\} = 0, \quad (12)$$

которое определяет энергетический спектр электрона в двухшаровой открытой СКТ $E_{n\ell}$, где

$$P_\ell = km_1 r_2 J_{\ell+1}(kr_2) K_\ell(\chi r_2) + J_\ell(kr_2) C_\ell(\chi r_2),$$

$$T_\ell^{(1)} = km_1 r_1 J_\ell(kr_1) \left[F_\ell(\chi r_0) K_\ell(\chi r_1) - I_\ell(\chi r_1) C_\ell(\chi r_0) - J_\ell(kr_1) (F_\ell(\chi r_1) C_\ell(\chi r_0) + F_\ell(\chi r_0) C_\ell(\chi r_1)) \right],$$

$$T_\ell^{(2)} = km_1 r_1 J_{\ell+1}(kr_1) [I_\ell(\chi r_1) K_\ell(\chi r_0) - I_\ell(\chi r_0) K_\ell(\chi r_1)] + J_\ell(kr_1) F_\ell(\chi r_1) K_\ell(\chi r_0) - I_\ell(\chi r_0) C_\ell(\chi r_1),$$

$$C_\ell(\chi r) = (m_0 - m_1) \ell K_\ell(\chi r) - m_0 r \chi K_{\ell+1}(\chi r),$$

$$D_\ell(kr) = (m_0 - m_1) \ell N_\ell(kr) + km_1 r N_{\ell+1}(kr),$$

$$F_\ell(\chi r) = (m_0 - m_1) \ell I_\ell(\chi r) + m_0 r \chi I_{\ell+1}(\chi r),$$

$$L_\ell(\chi r) = -m_0 r \chi K_{\ell+1}(\chi r) N_\ell(kr) + K_\ell(\chi r) D_\ell(kr),$$

$$\vartheta_\ell = [-F_\ell(\chi r_1) K_\ell(\chi r_0) + I_\ell(\chi r_0) C_\ell(\chi r_1)] N_\ell(kr_1) - km_1 r_1 [I_\ell(\chi r_1) K_\ell(\chi r_0) - I_\ell(\chi r_0) K_\ell(\chi r_1)] N_{\ell+1}(kr_1),$$

$$\eta_\ell = F_\ell(\chi r_0) L_\ell(\chi r_1) - m_0 r_1 \chi I_{\ell+1}(\chi r_1) C_\ell(\chi r_0) N_\ell(kr_1) - I_\ell(\chi r_1) C_\ell(\chi r_0) D_\ell(kr_1),$$

где $I_\ell(\chi r), K_\ell(\chi r)$ — видоизмененные функции Бесселя первого и второго рода.

Так как в следующем параграфе будет детально анализироваться эволюция электронного спектра трехшаровой двухъямной закрытой СКТ при изменении толщины (Δ_2) внешней шаровой ямы от нуля (простая закрытая СКТ) до бесконечности (простая открытая СКТ), для нас естественно аналитическим предельным переходом получить из волновых функций электрона в двухъямной закрытой СКТ и дисперсионного уравнения (12) соответствующие аналоги для простой закрытой (при $\Delta_2 \rightarrow 0$) и простой открытой СКТ (при $\Delta_2 \rightarrow \infty$).

Действительно, предельным аналитическим переходом $\Delta_2 \rightarrow 0$ из дисперсионного уравнения (12) в области энергий $E < U$ можно получить дисперсионное уравнение

$$\frac{j_1(kr_0)}{j_0(kr_0)} = i \frac{\chi m_0}{km_1} \frac{h_1^+(i\chi r_0)}{h_0^+(i\chi r_0)}, \quad (13)$$

определяющее энергетический спектр $E_{n\ell}^c$ простой закрытой СКТ, а из радиальных волновых функций $R_{n\ell}^c(r)$ двухъямной закрытой СКТ — функции

$$R_{n\ell}^c(r) \Big|_{\Delta_2=0} = \frac{A_R + B_R}{C_R + D_R / |h_0^+(i\chi r)|^2}, \quad (14)$$

совпадающие с радиальными функциями простой закрытой СКТ [2–5]. В соотношении (14)

$$\begin{aligned} A_R &= \frac{j_0(k_n r)}{j_0(k_n r_0)} \Big|_{r < r_0}, \\ B_R &= \frac{h_0^+(i\chi_n r)}{h_0^+(i\chi_n r_0)} \Big|_{r \geq r_0}, \\ C_R &= \frac{r_0^3}{2} \left[1 + \left| \frac{j_1(k_n r_0)}{j_0(k_n r_0)} \right|^2 \right], \\ D_R &= \int_0^\infty r^2 |h_0^+(i\chi_n r)|^2 dr. \end{aligned}$$

Получить спектр и волновые функции электрона простой **открытой** СКТ из двухъямной закрытой СКТ предельным переходом $\Delta_2 \rightarrow \infty$ аналитическим путем невозможно. Их можно определить путем решения стационарного уравнения Шредингера с использованием метода S -матрицы [12]. При таком подходе, если использовать обозначения, соответствующие открытой системе (рис. 1, с), решения уравнения Шредингера для радиальных волновых функций $R_{K\ell}^0$ могут быть найдены в виде

$$R_{K\ell}^0(r) = \begin{cases} R_\ell^{(0)}(kr) = kA_\ell^{(0)} [h_\ell^-(kr) + h_\ell^+(kr)] \\ R_\ell^{(1)}(i\chi r) = i\chi A_\ell^{(1)} [h_\ell^-(i\chi r) - S_\ell^{(1)} h_\ell^+(i\chi r)] \\ R_\ell^{(2)}(kr) = kA_\ell^{(2)} [h_\ell^-(kr) - S_\ell(k) h_\ell^+(kr)] \end{cases}. \quad (15)$$

Коэффициент $A_\ell^{(2)} = 1/\sqrt{2\pi}$ определяется с учетом условия нормировки

$$\int_0^\infty R_{k\ell}^* R_{k'\ell}(r) r^2 dr = \delta(k - k'). \quad (16)$$

Граничные условия непрерывности волновых функций и плотностей вероятности

$$\left. \begin{aligned} R_\ell^{(i)}(K_i r_i) &= R_\ell^{(i+1)}(K_{i+1} + r_i) \\ \frac{1}{m_i} \frac{dR_\ell^{(i)}(K_i r)}{dr} \Big|_{r=r_i} &= \frac{1}{m_{i+1}} \frac{dR_\ell^{(i+1)}(K_{i+1} r)}{dr} \Big|_{r=r_{i+1}} \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

однозначно определяют аналитические выражения для всех остальных коэффициентов:

$$A_\ell^{(0)} = -ik\chi m_0 m_1 v_\ell(i\chi r_0) v_\ell(kr_1) B_\ell(kr_1), \quad (18)$$

$$A_\ell^{(1)} = -km_1 v_\ell(kr_1) \left(\xi_\ell - \mu_\ell \frac{d}{dr_0} \right) h_\ell^+(i\chi r_0) B_\ell(kr_1), \quad (19)$$

$$S_\ell^{(1)} = - \frac{\left(\mu_\ell \frac{d}{dr_0} - \xi_\ell \right) h_\ell^-(i\chi r_0)}{\left(\mu_\ell \frac{d}{dr_0} - \xi_\ell \right) h_\ell^+(i\chi r_0)}. \quad (20)$$

Здесь

$$B_\ell(kr_1) = \left[\sqrt{2\pi} \left(\alpha_\ell \frac{d}{dr_1} - \beta_\ell + \gamma_\ell \frac{d}{dr_1} - \lambda_\ell \right) h_\ell^+(kr_1) \right]^{-1},$$

$$\alpha_\ell = km_1 \xi_\ell [h_\ell^-(i\chi r_1) h_\ell^+(i\chi r_0) - h_\ell^-(i\chi r_0) h_\ell^+(i\chi r_1)],$$

$$\beta_\ell = \chi m_0 \mu_\ell \left[\frac{dh_\ell^-(i\chi r_0)}{dr_0} \frac{dh_\ell^+(i\chi r_1)}{dr_1} - \frac{dh_\ell^-(i\chi r_1)}{dr_1} \frac{dh_\ell^+(i\chi r_0)}{dr_0} \right],$$

$$\gamma_\ell = m_0 m_1 \mu_\ell \left[h_\ell^+(i\chi r_1) \frac{dh_\ell^-(i\chi r_0)}{dr_0} - h_\ell^-(i\chi r_1) \frac{dh_\ell^+(i\chi r_0)}{dr_0} \right],$$

$$\lambda_\ell = \frac{\xi_\ell}{km_1} \left[h_\ell^-(i\chi r_0) \frac{dh_\ell^+(i\chi r_1)}{dr_1} - h_\ell^+(i\chi r_0) \frac{dh_\ell^-(i\chi r_1)}{dr_1} \right],$$

$$\mu_\ell = i\chi m_0 [h_\ell^-(kr_0) + h_\ell^+(kr_0)],$$

$$\xi_\ell = km_1 \left[\frac{dh_\ell^-(kr_0)}{dr_0} + \frac{dh_\ell^+(kr_0)}{dr_0} \right],$$

$$v_\ell(Kr) = h_\ell^+(Kr) \frac{dh_\ell^-(Kr)}{dr} - h_\ell^-(Kr) \frac{dh_\ell^+(Kr)}{dr},$$

а также аналитический вид S_ℓ -матриц:

$$S_\ell = \frac{\left(\alpha_\ell \frac{d}{dr_1} + \beta_\ell - \gamma_\ell \frac{d}{dr_1} - \lambda_\ell \right) h_\ell^-[kr_1]}{\left(\alpha_\ell \frac{d}{dr_1} - \beta_\ell + \gamma_\ell \frac{d}{dr_1} + \lambda_\ell \right) h_\ell^+[kr_1]}. \quad (21)$$

Действительная часть полюсов S_ℓ -матриц определяет резонансный энергетический спектр ($E_{\ell k}^0$), а мнимая ($\Gamma_{\ell n}$) — полуширины полос квазистационарных состояний электрона в простой открытой СКТ. Полученные таким образом спектр и волновые функции открытой СКТ описывают, как будет видно из следующего параграфа, граничный случай спектра и волновых функций электрона в трехшаровой закрытой двухъямной СКТ при $\Delta_2 \rightarrow \infty$.

3. Эволюция стационарного электронного спектра в двухъямной закрытой СКТ к квазистационарному спектру при изменении толщины внешней шаровой ямы

Развитая в предыдущем параграфе теория позволяет изучать эволюцию электронного стационарного спектра энергий в зависимости от толщины (Δ_2) внешней шаровой ямы в двухъямной закрытой СКТ. Совместно с анализом вероятностей пребывания электрона в пределах двух внутренних шаров этой трехслойной СКТ

$$W_{n\ell} = \int_0^{r_0+\Delta_1} |R_{n\ell}(r)|^2 r^2 dr \quad (22)$$

появляется возможность проследить и детально проанализировать процесс превращения электронного ста-

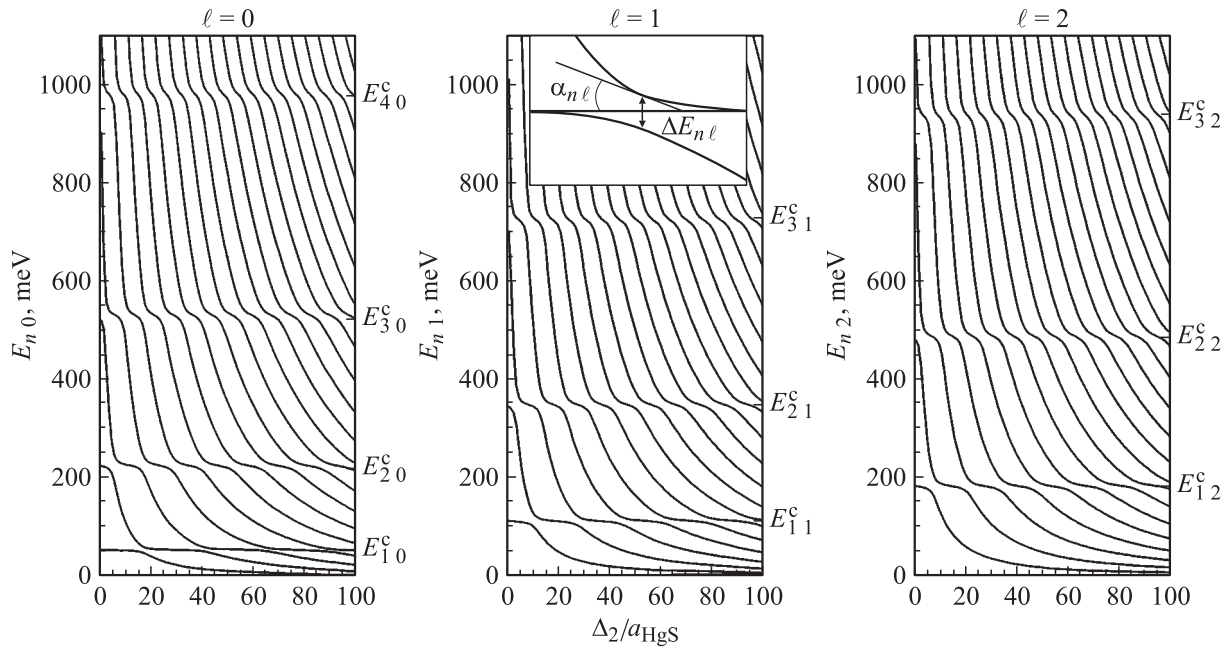


Рис. 2. Изменение вида электронных спектров в зависимости от толщины Δ_2 внешней квантовой ямы при малых размерах сферической квантовой точки.

ционарного спектра простой закрытой СКТ с малым значением Δ_2 в квазистационарный спектр простой открытой СКТ при $\Delta_2 \rightarrow \infty$.

Все расчеты были выполнены на примере системы HgS/CdS/HgS/CdS с параметрами:

$$m_{\text{HgS}} = 0.036m_0, \quad m_{\text{CdS}} = 0.2m_0, \quad U = 1350 \text{ мЭВ},$$

$$a_{\text{HgS}} = 5.851 \text{ \AA}, \quad a_{\text{CdS}} = 5.818 \text{ \AA},$$

которые хорошо удовлетворяют требованиям модели прямоугольного потенциала (с незначительной разницей в постоянных решеток, составляющих систему шаров). При расчетах геометрические параметры двухъямной закрытой СКТ были приняты такими: радиус ядра-ямы равен $r_0 = 20a_{\text{HgS}}$, толщина шарового барьера равна $\Delta_1 = a_{\text{CdS}}$, а ширина внешней шаровой ямы Δ_2 изменялась от нуля до бесконечности.

Значения величин энергетических уровней ($E_{n\ell}^c$) двухъямной закрытой СКТ, рассчитанные из дисперсионного уравнения (12) и соответствующих им резонансных уровней ($E_{n\ell}^o$) и полуширин ($\Gamma_{n\ell}$) квазистационарных полос простой открытой СКТ, рассчитанных с помощью полюсов S_ℓ -матриц, приведены в таблице. Эти величины, как будет видно из дальнейшего, являются предельными значениями соответствующих величин, характеризующих электрон в двухъямной закрытой СКТ при $\Delta_2 \rightarrow 0$ и простой открытой СКТ при $\Delta_2 \rightarrow \infty$. Из таблицы видно, что резонансные энергии $E_{1\ell}^o$ всех наиболее низких состояний электрона в простой открытой СКТ меньше, чем соответствующие им энергии $E_{1\ell}^c$ в простой закрытой СКТ, и наоборот, $E_{n\neq 1\ell}^o > E_{n\neq 1\ell}^c$. С увеличением

квантовых чисел n, ℓ возрастают величины и резонансных энергий $E_{n\ell}^o$, и полуширин $\Gamma_{n\ell}$ квазистационарных состояний простой открытой СКТ.

Проанализируем теперь эволюцию электронного спектра двухъямной закрытой СКТ при изменении толщины Δ_2 внешней шаровой ямы от нуля (простая закрытая СКТ) до бесконечности (простая открытая СКТ). Изменения энергетических спектров $E_{n\ell}$ в зависимости от толщины Δ_2 при малых ее значениях приведены на рис. 2, а при больших — на рис. 3.

Из рис. 2 видно, что при $\Delta_2 = 0$ спектр $E_{n\ell}$ электрона является стационарным и, как это и должно быть, совпадает со спектром $E_{n\ell}^c$ простой закрытой СКТ. С увеличением толщины Δ_2 все уровни спектра $E_{n\ell}$ уменьшаются по величине, образуя в окрестности энергий $E_{n\ell}^c$ (или $E_{n\ell}^o$) антикроссинги („бутылочные горла“). Причины возникновения антикроссингов уже неоднократно обсуждались [6,7]. Они связаны с эффектом „отталкивания уровней“ от обеих потенциальных ям,

Уровни энергии $E_{n\ell}^c$ в двухъямной закрытой СКТ (12), а также соответствующие им резонансные уровни $E_{n\ell}^o$ и полуширины $\Gamma_{n\ell}$ квазистационарных полос простой открытой СКТ

$E_{n\ell}^o/\Gamma_{n\ell}$	ℓ		
	0	1	2
$E_{1\ell}^c$, мЭВ	53.807	110.729	184.211
$E_{1\ell}^o/\Gamma_{1\ell}$, мЭВ	52.554/1.065	109.750/2.420	183.489/4.110
$E_{2\ell}^c$, мЭВ	223.998	344.941	484.896
$E_{2\ell}^o/\Gamma_{2\ell}$, мЭВ	224.180/4.491	346.741/6.220	488.914/7.954
$E_{3\ell}^c$, мЭВ	526.853	715.735	923.483
$E_{3\ell}^o/\Gamma_{3\ell}$, мЭВ	531.667/7.722	724.229/9.230	937.387/10.872

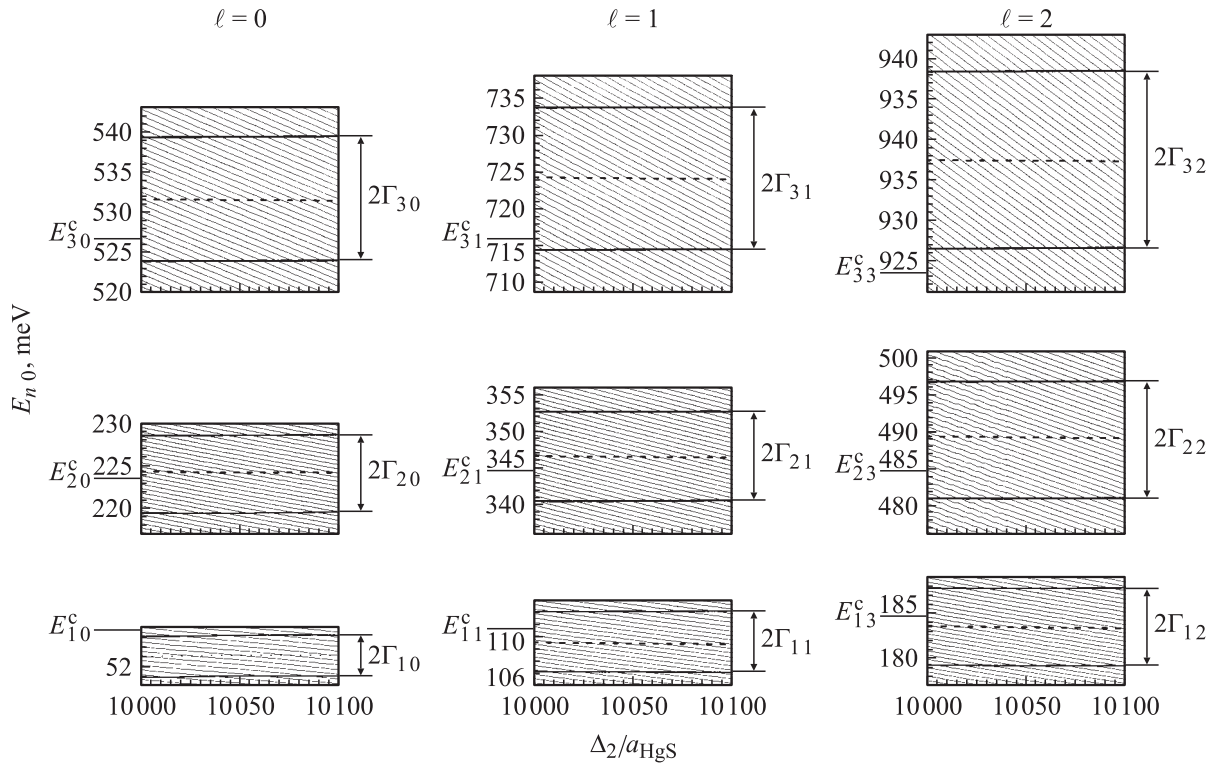


Рис. 3. Изменение вида электронных спектров в зависимости от толщины Δ_2 внешней квантовой ямы при больших размерах сферической квантовой точки.

появляющимся при учете их взаимодействия, из-за того что разграничивающий их потенциальный барьер имеет конечные высоту и ширину. Области энергий, в которых образуются антикроссинги, расположены в окрестностях стационарных уровней $E_{n\ell}^c$ закрытой однобарьерной системы. Горизонтальные участки зависимостей $E_{n\ell}$ от Δ_2 соответствуют состояниям электрона, в которых вероятность его пребывания в двух внутренних шарах наносистемы максимальна. Таким образом, горизонтальные участки $E_{n\ell}(\Delta_2)$ как бы „несут память“ о положении энергетического уровня $E_{n\ell}^c$ простой закрытой СКТ в спектре двухъямной закрытой СКТ, который при $\Delta_2 \rightarrow \infty$ превращается в резонансный уровень $E_{n\ell}^o$ простой открытой СКТ.

Из рис. 2 видно, что с увеличением Δ_2 изменяются два главных параметра каждого „бутылочного горла“: уменьшаются их размеры

$$\Delta E_{n\ell} = \min[E_{n\ell}(\Delta_2) - E_{n-1\ell}(\Delta_2)]$$

— минимальная разность энергий двух соседних уровней, образующих „горло“. Кроме того, уменьшается угол наклона „горла“ $\alpha_{n\ell}$ между горизонтальной линией и касательной к линии $E_{n\ell}(\Delta_2)$ при таком значении Δ_2 , при котором определяется размер этого „горла“.

Характер эволюции спектра энергий $E_{n\ell}$ с изменением Δ_2 при больших значениях толщины внешней шаровой ямы (рис. 3) существенно отличается от того,

что было при малых значениях Δ_2 (рис. 2). Как видно из рис. 3, при больших Δ_2 из-за сближения всех уровней спектра, а также из-за уменьшения величин $\Delta E_{n\ell}$ и уменьшения углов наклона $\alpha_{n\ell}$ каждого „бутылочного горла“ разница между двумя уровнями, образующими антикроссинг, и любыми двумя другими соседними уровнями постепенно стирается. Поэтому создается ложное впечатление, что при больших значениях Δ_2 „память“ о положении уровня $E_{n\ell}^c$ в спектре $E_{n\ell}$ как бы „стирается“. Однако эта информация в системе присутствует, как это и должно быть, но для ее выявления уже мало одного анализа спектра, необходимо исследовать также и вероятности нахождения электрона в двух внутренних шарах двухъямной закрытой СКТ в состояниях с разными значениями энергий.

Прежде чем анализировать зависимости вероятности пребывания электрона в двух внутренних шарах двухъямной закрытой СКТ ($W_{n\ell}$) от изменения Δ_2 , введем понятия резонансной энергии $\tilde{E}_{n\ell}$, которой соответствует состояние с максимальным значением $\tilde{W}_{n\ell} = \max W_{n\ell}$, и ширины дискретной полосы квазистационарных состояний ($2\tilde{\Gamma}_{n\ell}$) как интервала в окрестности резонансной энергии $\tilde{E}_{n\ell}$, определяемого из условия, что в состояниях, которые отвечают границам этого интервала $\tilde{E}_{n\ell} \pm \tilde{\Gamma}_{n\ell}$, вероятности нахождения электрона в обоих внутренних шарах двухъямной закрытой СКТ ($W_{n\ell}$) в 2 раза меньше, чем максимальная вероятность $\tilde{W}_{n\ell}$ нахождения в состоянии с резонансной энергией $\tilde{E}_{n\ell}$.

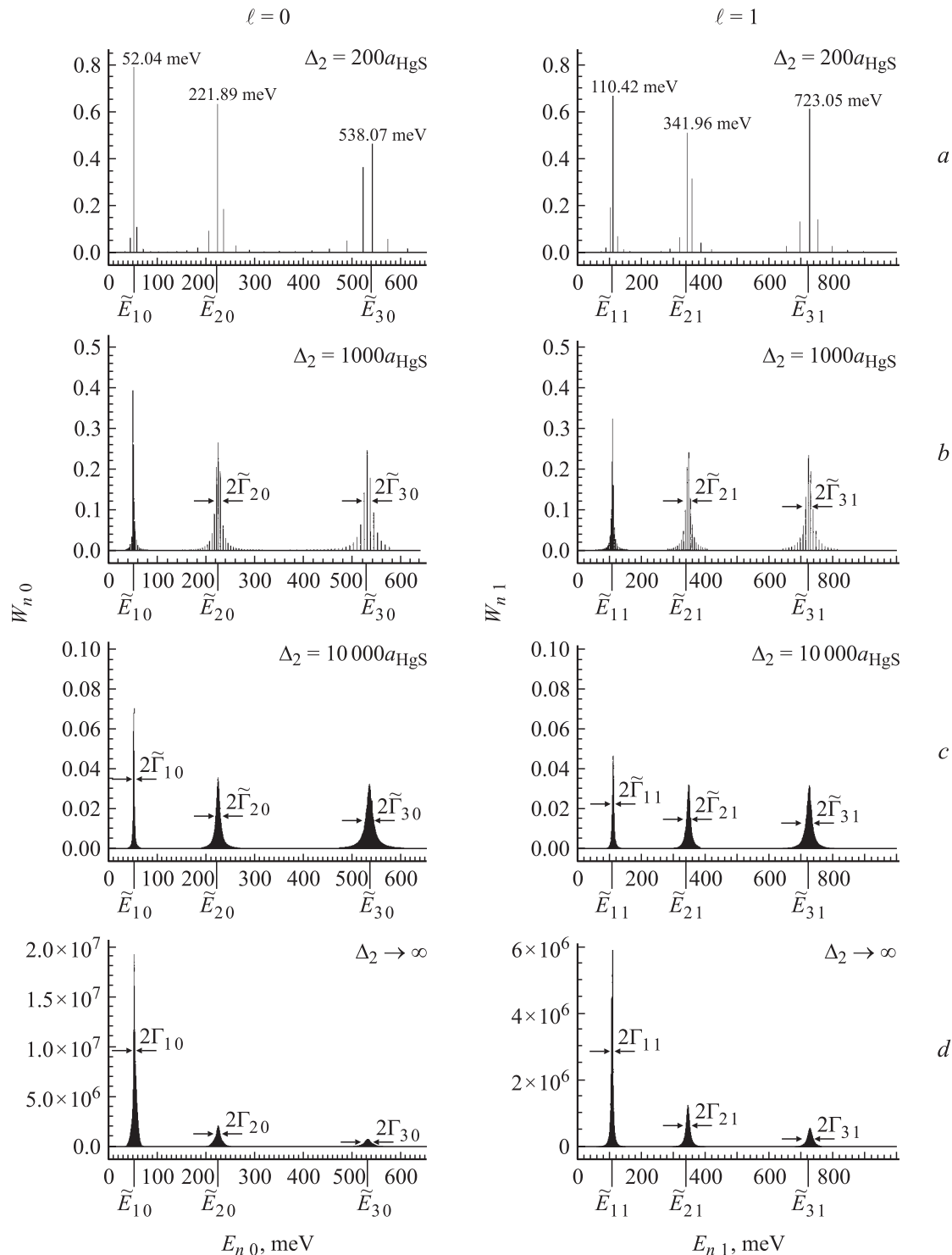


Рис. 4. Эволюция вероятностей $W_{n\ell}(E_{n\ell})$ пребывания электрона в двух внутренних шарах двухъямной закрытой квантовой точки (a–c) в зависимости от величины Δ_2 и зависимость $W_{n\ell}(E_{n\ell})$ в открытой квантовой точке (d). На рис. d $E_{n\ell} = E_{n\ell}^0$.

На рис. 4 приведены результаты расчетов $W_{n\ell}$ при $\ell = 0, 1$ в зависимости от величины Δ_2 . Из рисунка хорошо видна эволюция электронного спектра и вероятностей $W_{n\ell}$, которые иллюстрируют процесс образования квазистационарных состояний по мере увеличения размеров внешней шаровой ямы.

Из рис. 4, a видно, что при сравнительно узкой внешней шаровой яме ($\Delta_2 = 200 a_{\text{HgS}}$) вероятности нахождения электрона на резонансных уровнях $\tilde{E}_{n\ell}$ превышают вероятности нахождения на обоих или же на одном из соседних с ними уровнями больше чем в 2 раза. В этом случае, хотя дискретные полосы уже формируются, но

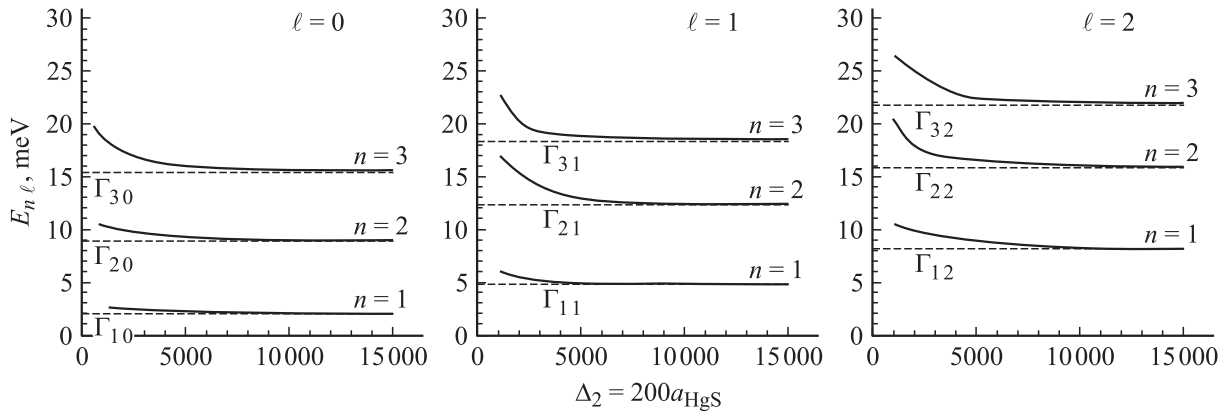


Рис. 5. Зависимости ширины дискретных полос квазистационарных состояний ($\tilde{\Gamma}_{n\ell}$) от толщины Δ_2 .

понятие полуширины полосы еще не возникает. Из рис. 4, *b* видно, что при толщине $\Delta_2 = 1000 a_{\text{HgS}}$ в области наиболее низкого резонансного состояния \tilde{E}_{10} дискретная полоса еще не характеризуется полушириной, но возле всех остальных резонансных состояний (\tilde{E}_{20} , \tilde{E}_{30} , \tilde{E}_{11} , \tilde{E}_{21} , \tilde{E}_{31}) уже выполняются условия возникновения полуширины дискретных полос ($\tilde{\Gamma}_{20}$, $\tilde{\Gamma}_{30}$, $\tilde{\Gamma}_{11}$, $\tilde{\Gamma}_{21}$, $\tilde{\Gamma}_{31}$). При толщине $\Delta_2 = 10000 a_{\text{HgS}}$ (рис. 4, *c*) уже все квазистационарные дискретные полосы характеризуются своими полуширинами. Из сравнения между собой рис. 4, *c* и 4, *d* видно, что положение резонансных уровней энергии $\tilde{E}_{n\ell}$ и ширины дискретных полос $2\tilde{\Gamma}_{n\ell}$ двухъямной закрытой СКТ (рис. 4, *c*) уже практически совпадают с резонансными энергиями $\tilde{E}_{n\ell}^o$ (рис. 4, *d*) и ширинами полос $2\Gamma_{n\ell}$ простой открытой СКТ, хотя вероятности нормированы, конечно, по-разному.

Таким образом, из рис. 4 видно, что с увеличением толщины внешней шаровой ямы Δ_2 происходит не только изменение электронного спектра (сближаются все электронные уровни), но изменяются и вероятности нахождения электрона на разных уровнях. Вероятности увеличиваются в окрестностях резонансных уровней и уменьшаются в промежуточных областях энергии. В спектрах образуются квазилоренцевы дискретные полосы, переходящие в непрерывные полосы при $\Delta_2 \rightarrow \infty$.

Возникновение и зависимости полуширин ($\tilde{\Gamma}_{n\ell}$) дискретных полос квазистационарных состояний электрона от размеров внешней ямы (Δ_2) в двухъямной закрытой СКТ и их сходимости при $\Delta_2 \rightarrow \infty$ к полуширинам $\Gamma_{n\ell}$ непрерывных полос в простой открытой СКТ, найденным через мнимые части полюсов S_ℓ -матрицы, хорошо видны на рис. 5. Из рисунка также видно, что с увеличением Δ_2 величины $\tilde{\Gamma}_{n\ell}$ уменьшаются и асимптотически приближаются к $\Gamma_{n\ell}$. С увеличением обоих квантовых чисел (n, ℓ) величины $\tilde{\Gamma}_{n\ell}$ и $\Gamma_{n\ell}$ возрастают в соответствии с тем фактом, что полуширины $\Gamma_{n\ell}$ связаны с соответствующими „временами жизни“ электрона ($\tau_{n\ell} = \hbar/\Gamma_{n\ell}$), а последние тем меньше, чем меньше величина эффективного потенциального барьера

$V - \tilde{E}_{n\ell}$, который преодолевается квазичастицей при ее вылете из СКТ во внешнюю среду.

Теперь понятно, что „время жизни“ $\tau_{n\ell} = \hbar/\Gamma_{n\ell}$ — это промежуток времени, на протяжении которого электрон, возбужденный в резонансное состояние ($E_{n\ell}^o$) в СКТ открытой системы, перераспределяется с соответствующими вероятностями по всем состояниям квазистационарной полосы с полушириной $\Gamma_{n\ell}$. Так как эти состояния принадлежат всей открытой системе, $\tau_{n\ell}$ [12] является временем вылета электрона из квантовой точки в открытое пространство всей системы.

Любопытно отметить разницу в информативности двух очень близких по своим свойствам наногетеросистем: закрытой трехшаровой двухъямной СКТ с очень большим размером внешней шаровой ямы и простой открытой СКТ.

В случае двухъямной закрытой СКТ существует единственный способ определения резонансных уровней энергии электрона ($\tilde{E}_{n\ell}$) и полуширин ($\tilde{\Gamma}_{n\ell}$) полос квазистационарных состояний: сначала с помощью решения дисперсионного уравнения определяется энергетический спектр $E_{n\ell}$, а затем из распределения вероятностей $W(E_{n\ell})$ находятся положения максимумов $\tilde{W}(E_{n\ell})$, которые и соответствуют резонансным энергиям $E_{n\ell}$, а полуширины $\tilde{\Gamma}_{n\ell}$ полос квазистационарных состояний определяются из условия $2W(\tilde{E}_{n\ell} \pm \tilde{\Gamma}_{n\ell}) = \tilde{W}(\tilde{E}_{n\ell})$.

В случае простой открытой СКТ существует два способа определения резонансных энергий $E_{n\ell}^o$ и полуширин $\Gamma_{n\ell}$. Первый, постоянно используемый в литературе [14], заключается в том, что вычисляются полюса S_ℓ -матриц, действительные части которых определяют резонансные энергии $E_{n\ell}^o$, а мнимые — полуширины $\Gamma_{n\ell}$ полос квазистационарных состояний. Второй, показанный в этой работе способ состоит в том, что из распределения вероятностей по энергиям $W_{n\ell}(E_{n\ell})$ (рис. 4, *d*) определяются положения максимумов $\tilde{W}_{n\ell}(E_{n\ell}^o)$, которые и соответствуют резонансным энергиям $E_{n\ell}^o$, а условие $2W_{n\ell}(E_{n\ell}^o \pm \Gamma_{n\ell}) = \tilde{W}_{n\ell}(E_{n\ell}^o)$ определяет полуширины $\Gamma_{n\ell}$ полос квазистационарных состояний. Как видно из полученных здесь результатов, оба способа расчетов дают совпадающие значения.

4. Заключение

Отметим, что развитый в этой работе подход позволяет в принципе решать задачи о спектрах и затухании квазичастиц (экситонов), взаимодействующих как между собой (электрон и дырка), так и с квантованными полями (фононы) в открытых СКТ. Аппроксимируя с необходимой точностью открытую наносистему соответствующей закрытой СКТ с очень большой шириной внешней ямы, теперь мы можем решать эти задачи хорошо развитыми методами вторичного квантования с применением аппарата функций Грина, что и будет выполнено в следующих работах.

Список литературы

- [1] Ж.И. Алфёров. ФТП, **32** (1), 3 (1998).
- [2] D. Schoss, A. Mews, A. Eychmuller, H. Weller. Phys. Rev. B, **49** (24), 17 078 (1994).
- [3] A. Mews, A.V. Kadavanich, U. Banin, A.P. Alivisator. Phys. Rev. B, **53** (20), 13 242 (1996).
- [4] М. Ткач, Н. Головацкий, М. Михалёва, Р. Фартушинский. ФТП, **43** (7), 1315 (2001).
- [5] R. Fartushynsky, M. Mikhalyova, M. Tkach. Condens. Mater. Phys., **4** (3 (27)), 579 (2001).
- [6] М. Ткач, Н. Головацкий. ФТП, **41** (11), 2081 (1999).
- [7] М. Tkach, V. Holovatsky, O. Voitsekhivska. Physica E, № 11, 17 (2001).
- [8] Y. Wang, N. Zhu, J. Wang, H. Guo. Phys. Rev. B, **53** (24), 16 408 (1996).
- [9] M.C. Klein, F. Hache, D. Ricard, C. Flytzanis. Phys. Rev. B, **42**, 11 143 (1990).
- [10] Н.В. Ткач. ФТП, **36** (11), 3221 (1994).
- [11] М. Tkach, V. Holovatsky, O. Voitsekhivska, M. Mikhalyova. Phys. Status Solidi (b), **207**, 373 (1997).
- [12] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика* (М.: Физматгиз, 1963).
- [13] А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский. *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (М., Физматгиз, 1962).
- [14] А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов. *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике* (М., Наука, 1971).

Редактор Т.А. Полянская

The characteristics of an electron spectrum and those of a two-well closed spherical quantum dot; its evolution as a function of the outer well thickness

N.V. Tkach, Ju.A. Sety

The Chernovtsy National University,
58012 Chernovtsy, Ukraine