

Спектр электрона в квантовой сверхрешетке цилиндрической симметрии

© Н.В. Ткач, И.В. Пронишин, А.М. Маханец

Черновицкий государственный университет,
274012 Черновцы, Украина

(Поступила в Редакцию 17 июля 1997 г.
В окончательной редакции 30 сентября 1997 г.)

Изучена квантовая сверхрешетка аксиальной симметрии — гетероструктура, в которой два контактирующих полупроводниковых материала в виде коаксиальных проволок наноразмерного сечения образуют периодическую структуру в радиальном направлении. Показано, что энергетический спектр электрона представляет собой чередование разрешенных и запрещенных зон. Исследован закон дисперсии электрона для разных значений периода потенциала, толщин полупроводниковых слоев и радиуса внутреннего кристалла системы. Показано, что когерентная эффективная масса электрона квантовой сверхрешетки оказывается тензором: продольная составляющая близка по значению к эффективной массе электрона полупроводникового материала, характеризующего квантовую яму сверхрешетки, а радиальная составляющая существенно зависит от периода потенциала, толщин коаксиальных полупроводниковых слоев и радиуса ядра гетеросистемы, причем в разных разрешенных зонах она положительная или отрицательная.

Полупроводниковые гетерогенные системы наноразмеров являются важными объектами исследования физики твердого тела в связи с возможностью их использования в элементной базе ЭВМ новых поколений, в лазерной технике. Значительный интерес вызывают исследования квазиодномерных (квантовые проволоки) и нульмерных (квантовые точки) гетероструктур [1–6], поскольку в этих системах можно наблюдать уникальные оптические и кинетические свойства, не характерные для массивных кристаллов.

В подавляющем большинстве работ [1–3,7] экспериментально и теоретически исследовались спектры квазичастиц в простых гетеросистемах — полупроводниковом нанокристалле определенной геометрии, помещенном в диэлектрическую среду. Несомненный интерес представляет исследование спектров квазичастиц в неоднородных полупроводниковых гетероструктурах — цилиндрических квантовых проволоках, вложенных друг в друга и образующих периодическую структуру в плоскости, перпендикулярной оси системы. Поскольку такая система имеет наноразмерный радиальный период, она является квантовой сверхрешеткой аксиальной симметрии со специфическими свойствами, отличающими ее от трехмерных аналогов. В настоящее время экспериментально реализована [6] сферическая гетероструктура с несколькими полупроводниковыми слоями CdS/HgS/CdS/H₂O, поэтому создание цилиндрической квантовой сверхрешетки вполне реально.

Цель настоящей работы — исследовать спектр электронов в квантовой сверхрешетке аксиальной симметрии, радиальный период которой содержит два контактирующих полупроводниковых материала.

1. Квантовая цилиндрическая сверхрешетка

Исследуется гетеросистема, в которой два контактирующих полупроводниковых материала в виде коаксиальных проволок наноразмерного сечения образуют периодическую структуру в плоскости, перпендикулярной оси системы (рис. 1, а). Такая цилиндрическая квантовая сверхрешетка создает для электрона периодическое радиально-симметричное поле (отсчет энергии производится вверх от дна потенциальной ямы) (рис. 1, б)

$$U(\rho) = \begin{cases} U_0, & \rho_0 + pL \leq \rho \leq \rho_0 + a + pL, \\ 0, & \rho \leq \rho_0, \quad \rho_0 + a + pL \leq \rho \leq \rho_0 + (p+1)L, \end{cases}$$

$$p = 0, 1, 2, \dots \quad (1)$$

Период потенциала $L = a + b$, a — ширина барьера (материал 1), b — ширина квантовой ямы (материал 2), ρ_0 — радиус внутреннего цилиндра (материал 2). В каждой среде электрон характеризуется своей эффективной массой, поэтому

$$\mu(\rho) = \begin{cases} \mu_1, & \rho_0 + pL \leq \rho \leq \rho_0 + a + pL, \\ \mu_2, & \rho \leq \rho_0, \quad \rho_0 + a + pL \leq \rho \leq \rho_0 + (p+1)L, \end{cases}$$

$$p = 0, 1, 2, \dots \quad (2)$$

В связи с зависимостью $\mu(\rho)$ переменные ρ и z в уравнении Шредингера не разделяются, поэтому для его

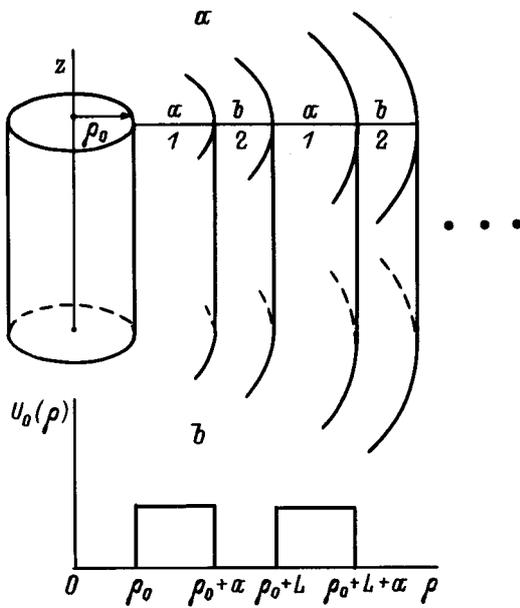


Рис. 1. Геометрия цилиндрической сверхрешетки (а) и потенциальная энергия электрона в сверхрешетке как функция радиус-вектора ρ (b).

решения применим теорию возмущений. Гамильтониан электрона в цилиндрической системе координат представим в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0(\rho, \varphi, z) + \Delta\hat{H}(\rho, z), \quad (3)$$

где невозмущенный гамильтониан

$$\hat{H}_0(\rho, \varphi, z) = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\nabla_{\rho, \varphi} \frac{1}{\mu(\rho)} \nabla_{\rho, \varphi} + \frac{1}{\mu} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(\rho), \quad (4)$$

а возмущение

$$\Delta\hat{H}(\rho, z) = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{\mu(\rho)} - \frac{1}{\bar{\mu}} \right) \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad (5)$$

$$\bar{\mu} = \frac{1}{2}(\mu_1 + \mu_2). \quad (6)$$

Из уравнения Шредингера

$$\{ \hat{H}_0(\rho, \varphi, z) - E_{nmk}^0 \} \Psi_{nmk}^0(\rho, \varphi, z) = 0 \quad (7)$$

определяются энергетический спектр и волновые функции электрона в нулевом приближении

$$E_{nmk}^0 = E_{nm} + \frac{\hbar^2 k^2}{2\bar{\mu}}, \quad (8)$$

$$\Psi_{nmk}^0(\rho, \varphi, z) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{i(m\varphi + kz)} \Psi_{nm}(\rho), \quad (9)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$ — радиальное квантовое число, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ — магнитное квантовое число,

k — квазиимпульс электрона в продольном направлении, E_{nm} — энергетический спектр радиального движения электрона, $\Psi_{nm}(\rho)$ — радиальная волновая функция, \hbar — длина основной области проволоки вдоль оси Oz .

Энергия электрона в первом приближении равна

$$E_{nmk}^{(1)} = E_{nmk}^0 + \langle nmk | \Delta\hat{H} | nmk \rangle. \quad (10)$$

После преобразований соотношение (10) принимает вид

$$E_{nmk}^{(1)} = E_{nmk}^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu_{\parallel}}, \quad (11)$$

где величина μ_{\parallel} — продольная составляющая когерентной эффективной массы электрона квантовой цилиндрической сверхрешетки в первом приближении,

$$\mu_{\parallel} = \frac{\bar{\mu}}{1 + I\mu}, \quad (12)$$

где

$$I = \left\langle nm \left| \frac{1}{\mu(\rho)} - \frac{1}{\bar{\mu}} \right| nm \right\rangle. \quad (13)$$

Поскольку потенциальная энергия $U(\rho)$ является периодической функцией (с периодом L), радиальное уравнение Шредингера инвариантно по отношению ко всем трансляциям, кратным L

$$U(\rho + L) = U(\rho), \quad \rho \rightarrow \rho + pL, \quad p = 1, 2, 3, \dots \quad (14)$$

Согласно теореме Флоке [8], радиальная волновая функция электрона в области периодичности потенциала $\rho \geq \rho_0$ имеет вид

$$\Psi_{nm}(\rho + pL) = e^{ipqL} \Psi_{nm}(\rho), \quad (15)$$

где q — вещественное число, значения которого лежат в интервале $-\pi/L \leq q \leq \pi/L$. Соотношение (15) возможно лишь в том случае, если

$$\Psi_{nm}(\rho) = e^{iq\rho} f_{nmq}(\rho), \quad (16)$$

где $f_{nmq}(\rho)$ — периодическая функция, т. е.

$$f_{nmq}(\rho) = f_{nmq}(\rho + L). \quad (17)$$

Учитывая вышесказанное и используя решения радиальных уравнений Шредингера для соответствующих областей гетероструктуры и граничных условий, которые требуют непрерывности радиальных волновых функций и плотности их потоков на границах областей

$$\Psi_{nmp}(\rho_p) = \Psi_{nm, p+1}(\rho_p), \quad (18)$$

$$\frac{1}{\mu_p} \frac{\partial}{\partial \rho} \Psi_{nmp}(\rho_p) = \frac{1}{\mu_{p+1}} \frac{\partial}{\partial \rho} \Psi_{nm, p+1}(\rho_p), \quad (19)$$

получаем радиальную волновую функцию в виде

$$\Psi_{nm}(\rho) = \begin{cases} A_0 J_{|m|}(\alpha\rho), & \rho \leq \rho_0, \\ A_0 e^{iq\rho} \begin{cases} \Gamma_1 I_{|m|}(\alpha\rho) + \Gamma_2 K_{|m|}(\alpha\rho), & \rho_0 + pL \leq \rho \leq \rho_0 + a + pL, \\ \Gamma_3 I_{|m|}(\beta\rho) + \Gamma_4 N_{|m|}(\beta\rho), & \rho_0 + a + pL \leq \rho \leq \rho_0 + (p+1)L. \end{cases} \end{cases} \quad (20)$$

В выражении (20) $J_{|m|}(\rho)$, $N_{|m|}(\rho)$ — функции Бесселя первого и второго рода, $I_{|m|}(\rho)$, $K_{|m|}(\rho)$ — модифицированные функции Бесселя, Γ_i ($i = 1-4$) — определенные из системы уравнений (18), (19) коэффициенты, которые из-за громоздкости выражений здесь не приводятся, величины

$$\alpha \equiv \alpha_{nm} = \hbar^{-1} \sqrt{2\mu_1(U_0 - E_{nm})},$$

$$\beta \equiv \beta_{nm} = \hbar^{-1} \sqrt{2\mu_2 E_{nm}} \quad (21)$$

определяют спектр системы.

Нормировка радиальной волновой функции (20) определяет коэффициент A_0

$$A_0 = \left[\int_0^\infty |\Psi_{nm}(\rho)|^2 \rho d\rho \right]^{-1/2}. \quad (22)$$

Решения радиальных уравнений Шредингера для соответствующих областей гетеросистемы с учетом соотношения (15) представим в виде

$$\Psi_{nm}(\rho) = \begin{cases} A_0 J_{|m|}(\beta\rho), & \rho \leq \rho_0, \\ A_1 I_{|m|}(\alpha\rho) + B_1 K_{|m|}(\alpha\rho), & \rho_0 \leq \rho \leq \rho_1, \\ A_2 J_{|m|}(\beta\rho) + B_2 N_{|m|}(\beta\rho), & \rho_1 \leq \rho \leq \rho_2, \\ e^{iqL} \left[A_1 \frac{I_{|m|}(\alpha\rho_0)}{I_{|m|}(\alpha\rho_2)} I_{|m|}(\alpha\rho) + B_1 \frac{K_{|m|}(\alpha\rho_0)}{K_{|m|}(\alpha\rho_2)} K_{|m|}(\alpha\rho) \right], & \rho_2 \leq \rho \leq \rho_2 + a, \end{cases} \quad (23)$$

где $\rho_1 = \rho_0 + a$, $\rho_2 = \rho_0 + L$.

Учитывая граничные условия (18), (19) для волновых функций (23), получим систему линейных однородных уравнений относительно коэффициентов A_s , B_s ($s=0,1,2$) и дисперсионное уравнение для определения спектра энергий

$$F(E_{nm}) = \cos(qL), \quad (24)$$

где функция F определена выражением

$$F(E_{nm}) = \frac{\pi\alpha\beta\rho_1\rho_2}{2} \times \left\{ \begin{aligned} & \left[J_{|m|}(\beta\rho_2) N'_{|m|}(\beta\rho_1) - N_{|m|}(\beta\rho_2) J'_{|m|}(\beta\rho_1) \right] \\ & \times \left[I_{|m|}(\alpha\rho_1) K_{|m|}(\alpha\rho_0) \frac{K'_{|m|}(\alpha\rho_2)}{K_{|m|}(\alpha\rho_2)} - K_{|m|}(\alpha\rho_1) I_{|m|}(\alpha\rho_0) \frac{I'_{|m|}(\alpha\rho_2)}{I_{|m|}(\alpha\rho_2)} \right] \\ & + \left[J_{|m|}(\beta\rho_1) N'_{|m|}(\beta\rho_2) - N_{|m|}(\beta\rho_1) J'_{|m|}(\beta\rho_2) \right] \\ & \times \left[I_{|m|}(\alpha\rho_0) K_{|m|}(\alpha\rho_1) - K_{|m|}(\alpha\rho_0) I_{|m|}(\alpha\rho_1) \right] \\ & + \frac{\mu_1\beta}{\mu_2\alpha} \left[J'_{|m|}(\beta\rho_1) N'_{|m|}(\beta\rho_2) - N'_{|m|}(\beta\rho_1) J'_{|m|}(\beta\rho_2) \right] \\ & \times \left[I_{|m|}(\alpha\rho_1) K_{|m|}(\alpha\rho_0) - K_{|m|}(\alpha\rho_1) I_{|m|}(\alpha\rho_0) \right] \\ & + \frac{\mu_2\alpha}{\mu_1\beta} \left[K_{|m|}(\alpha\rho_0) I'_{|m|}(\alpha\rho_1) \frac{K'_{|m|}(\alpha\rho_2)}{K_{|m|}(\alpha\rho_2)} - I_{|m|}(\alpha\rho_0) K'_{|m|}(\alpha\rho_1) \frac{I'_{|m|}(\alpha\rho_2)}{I_{|m|}(\alpha\rho_2)} \right] \\ & \times \left[J_{|m|}(\beta\rho_1) N_{|m|}(\beta\rho_2) - N_{|m|}(\beta\rho_1) J_{|m|}(\beta\rho_2) \right] \end{aligned} \right\}. \quad (25)$$

В случае, если

$$|F(E_{nm})| \leq 1, \quad (26)$$

уравнение (24) имеет действительные решения, и энергия E_{nm} является функцией от квантового числа q , играющего роль радиального квазимпульса. В противном случае возникают запрещенные зоны энергий. В результате энергетический спектр электрона E_{nm} представляет собой чередование разрешенных и запрещенных зон.

2. Обсуждение результатов

В качестве материалов, реализующих рассмотренную периодическую в радиальном направлении структуру, выберем широко используемые экспериментаторами [6] полупроводники CdS (материал 1), HgS (материал 2) кубической гранецентрированной модификации (β). Параметры этих кристаллов следующие [6]: $U_0 = 1.2$ eV, эффективные массы электрона $\mu_1 = \mu_{CdS} = 0.2\mu_0$, $\mu_2 = \mu_{HgS} = 0.036\mu_0$, μ_0 — масса электрона в вакууме, постоянные решетки $c_1 = c_{CdS} = 5.818$ Å, $c_2 = c_{HgS} = 5.851$ Å.

Перейдем к анализу энергетического спектра электрона в цилиндрической сверхрешетке CdS/HgS с наноразмерным радиальным периодом. На рис. 2 изображен закон дисперсии $E_{nm}(q)$ электрона в этой гетероструктуре при $m = 0$, фиксированном радиусе внутреннего кристалла (HgS) $\rho_0 = 20c_2$ и разных значениях толщин полупроводниковых слоев a и b . Гетеросистема характеризуется конечным по величине барьером U_0 , и поэтому в квантовой яме существует конечное число зон разрешенных энергий. Серии кривых на рис. 2 при фиксированном m , начиная с нижней кривой, отвечают значения радиального квантового числа $n = 0, 1, 2, \dots$. При малых значениях параметра b в области энергий $0 \leq E_{nm} \leq U_0$ существует одна разрешенная зона (основное состояние — $n = 0, m = 0$), энергетическое положение которой определено размерами ямы HgS. С увеличением ширины b потенциальной ямы HgS и уменьшением ширины a барьера CdS в этой области появляется следующая разрешенная зона, которая монотонно сдвигается в направлении дна ямы при этом происходит ее расширение. Чем больше размеры b ямы HgS, тем больше разрешенных зон находится в ней.

Исследования показывают, что чем больший период потенциала L , тем больше разрешенных зон находится в области энергий $0 \leq E_{nm} \leq U_0$.

Одна из особенностей зон, изображенных на рис. 2, состоит в следующем: зависимости $E_{nm}(q)$ у дна и у потолка каждой зоны таковы, что $dE_{nm}/dq = 0, d^2E_{nm}^2/dq^2 \neq 0$. В разрешенных зонах, которым соответствует квантовое число $n = 0, 2, 4, \dots$ ($n = 1, 3, 5, \dots$), кривизна функции $E_{nm}(q)$ такова, что радиальная составляющая эффективной массы электрона квантовой сверхрешетки (когерентного состояния) μ_{nm} принимает положительные (отрицательные) значения. Эти особенности присущи всем разрешенным зонам системы.

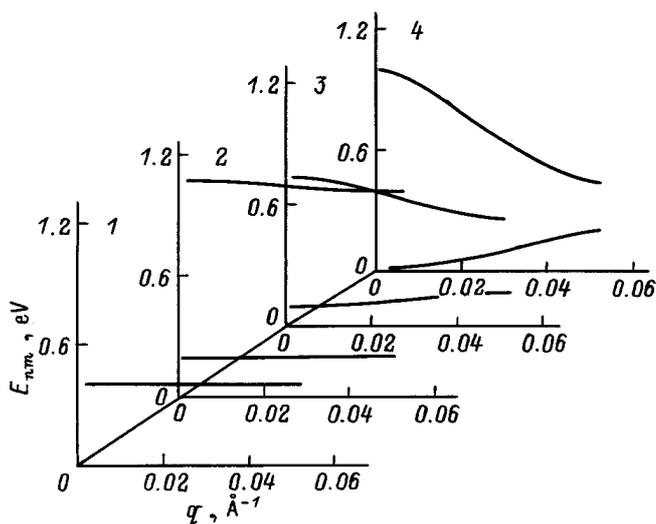


Рис. 2. Закон дисперсии электрона при $m = 0, \rho_0 = 20c_2$ и разных значениях ширины барьера и квантовой ямы. 1 — $a = 6c_1, b = 4c_2$, 2 — $a = 3c_1, b = 7c_2$, 3 — $a = 2c_1, b = 8c_2$, 4 — $a = 0, b = 10c_2$.

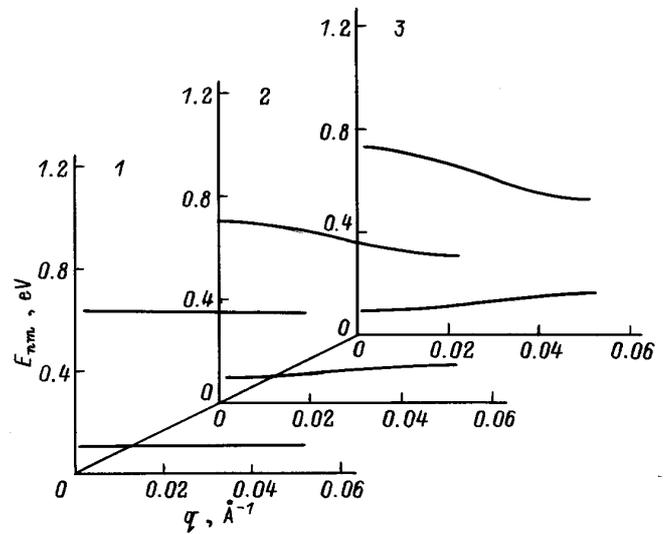


Рис. 3. Закон дисперсии электрона при $m = 0, L = 1c_1 + 9c_2$ для разных значений радиуса ρ_0 внутреннего кристалла. $\rho_0 = 0$ (1), $20c_2$ (2) $100c_2$ (3).

На рис. 3 изображена зависимость энергии E_{nm} от радиального волнового вектора q при $m = 0$ и фиксированном периоде потенциала $L = a + b, a = 1c_1, b = 9c_2$ для различных значений радиуса ρ_0 внутреннего кристалла HgS. При таком L и значении $\rho_0 = 0$ (рис. 3, а) в квантовой яме HgS сверхрешетки существуют две зоны разрешенных энергий (основное ($n = 0, m = 0$) и возбужденное ($n = 1, m = 0$) состояния электрона). Энергии этих состояний постоянны во всей зоне Бриллюэна (энергетические уровни), и электрон, находясь в них, характеризуется бесконечно большой эффективной массой μ_{nm} . Размеры ядра гетеросистемы существенно влияют на ширину разрешенных зон, на кривизну закона дисперсии $E_{nm}(q)$, а значит, и на эффективную массу μ_{nm} электрона. Чем больше ρ_0 , тем больше распрямляются границы цилиндрических поверхностей, происходит расширение обеих зон и уменьшается величина радиальной составляющей эффективной массы электрона. На рис. 4 изображены зависимости $\mu_{nm}(\rho_0)$ для разных толщин слоев полупроводниковых материалов: a (CdS) и b (HgS) при одинаковом периоде потенциала L . Эффективная масса μ_{nm} электрона в основном состоянии ($n = 0, m = 0$) положительная, в возбужденном состоянии ($n = 1, m = 0$) — отрицательная. Чем больше ширина b квантовой ямы (HgS) и меньше ширина a барьера (CdS) (период $L = a + b$ постоянный), тем меньше по величине граничные значения (при $\rho_0 = 1c_2$ и $30c_2$) эффективных масс μ_{nm} электрона квантовой сверхрешетки. При $L = 1c_1 + 9c_2$ (кривая 1 на рис. 4) μ_{nm} основного состояния электрона уменьшается от $\mu_1 = 0.2\mu_0$ (при $\rho_0 = 1c_2$) до значения $\mu_{nm} = 0.1\mu_0 > \mu_2$ (при $\rho_0 = 30c_2$) и с дальнейшим увеличением ρ_0 практически не изменяется. Начиная со значения $\rho_0 \approx 30c_2$ до $\rho_0 \rightarrow \infty$ (граничный переход к плоской сверхрешетке), закон дисперсии электрона $E_{nm}(q)$ практически не изме-

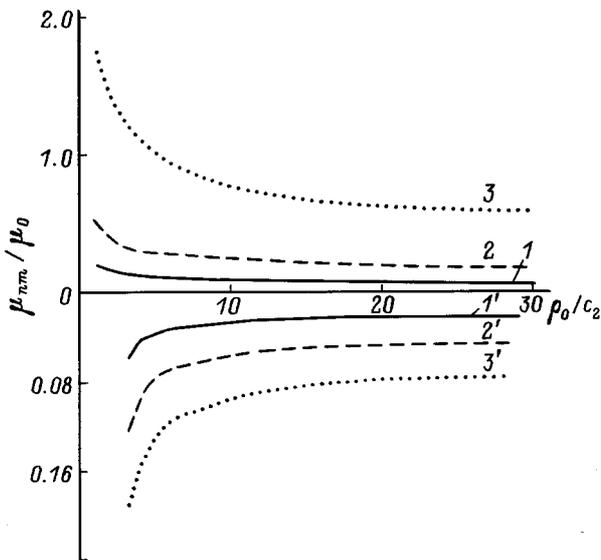


Рис. 4. Зависимость радиальной составляющей эффективной массы электрона сверхрешетки от радиуса внутреннего кристалла. $n = 0$ (1–3) и 1 (1'–3'). $L = 1c_1 + 9c_2$ (1, 1'), $2c_1 + 8c_2$ (2, 2') и $3c_1 + 7c_2$ (3, 3').

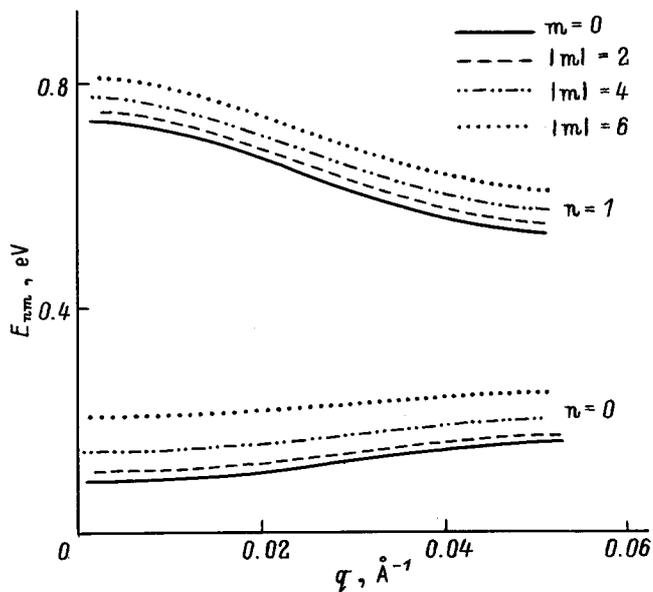


Рис. 5. Закон дисперсии электрона при $\rho_0 = 20c_2$, $L = 1c_1 + 9c_2$ для разных значений магнитного квантового числа.

няется и совпадает с E_{nm} плоской сверхрешетки (при таких же параметра L , U_0 , μ_1 , μ_2). Как показывают исследования при $\rho_0 \rightarrow \infty$ (плоская сверхрешетка), когда ширина барьера $a = 0$ (ширина ямы конечная $b = L$), в области энергий $0 \leq E_{nm} \leq U_0$ запрещенная зона отсутствует, кривые $E(q)$ в центре зоны Бриллюэна начинаются или со дна или с вершины и на границе зоны Бриллюэна совпадают, поэтому все энергии являются разрешенными.

Совсем другая ситуация наблюдается при конечных значениях ρ_0 . Радиальная симметрия цилиндрической квантовой сверхрешетки (другими словами, кривизна границ цилиндрических поверхностей) настолько важна, что изменяется характер спектра электрона по сравнению с плоской сверхрешеткой. При конечных значениях ρ_0 и $b = L$ ($a = 0$) (рис. 2) существует запрещенная зона, ширина которой определена параметрами системы.

Отметим, что эффективная масса электрона является тензором. Численные расчеты, проведенные по формуле (12) для продольной составляющей $\mu_{||}$ когерентной эффективной массы электрона квантовой сверхрешетки, показывают, что эта величина близка по значению к эффективной массе электрона полупроводникового материала HgS, характеризующего квантовую яму сверхрешетки. Радиальная составляющая эффективной массы μ_{nm} электрона квантовой сверхрешетки (когерентного состояния) существенно зависит от радиуса ядра гетероструктуры, периода и величина потенциала, толщины полупроводниковых коаксиальных слоев.

На рис. 5 изображен закон дисперсии $E_{nm}(q)$ при фиксированных $\rho_0 = 20c_2$ и $L = 1c_1 + 9c_2$ для разных значений магнитного квантового числа. Чем больше m , тем большая энергия E_{nm} возбужденных состояний электрона в сверхрешетке, причем положения разрешенных зон при $|m| \geq 1$ монотонно сдвинуты вверх относительно положений зон при $m = 0$. Картина энергетического спектра следующая: основное состояние — $n = 0, m = 0$, первое возбужденное — $n = 0, m = 1$, второе возбужденное — $n = 0, m = 2$ и т.д. Кривизна $E_{nm}(q)$ такова, что при $n = 0, 2, 4, \dots$ $\mu_{nm} > 0$, а при $n = 1, 3, 5, \dots$ $\mu_{nm} < 0$.

Главный вывод работы состоит в том, что в квантовой сверхрешетке цилиндрической симметрии возникают сложные когерентные состояния электрона с анизотропными эффективными массами, которые зависят от параметров гетеросистемы. Анизотропия эффективных масс должна проявляться на соответствующих оптических (коэффициент поглощения, диэлектрическая проницаемость) и динамических (проводимость) характеристиках систем, исследуемых экспериментально.

Список литературы

- [1] S.L. Goff, B. Stebe. Phys. Rev. **B47**, 3, 1383 (1993).
- [2] C. Greus, R. Spiegel, P.A. Knipp, T.L. Reinecke. Phys. Rev. **B49**, 8, 5753 (1994).
- [3] G.Q. Hai, F.M. Peeters, J.T. Devreese, L. Wendler. Phys. Rev. **B48**, 16, 12016 (1993).
- [4] C. Greus, L. Butov, P.A. Knipp. Phys. Rev. **B47**, 12, 7626 (1993).
- [5] Н.В. Ткач, В.И. Бойчук, В.А. Головацкий, О.Н. Войцехивская. ФТТ **38**, 10, 3161 (1996).
- [6] D. Schooss, A. Mews, A. Eychmuller, H. Weller. Phys. Rev. **B49**, 24, 17072 (1994).
- [7] M.F. Lin, W. Kenneth, K. Shung. Phys. Rev. **B47**, 11, 6617 (1993).
- [8] З. Флогге. Задачи по квантовой механике. Мир, М. (1974). Т. 1. 342 с.