ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 10, № 4 (2006) с. 315–329

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 10, No. 4 (2006) p. 315–329

СПЕКТРИ КВАЗІЧАСТИНОК У БАГАТОШАРОВИХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ НАНОГЕТЕРОСИСТЕМАХ

М. В. Ткач, О. М. Войцехівська, В. А. Головацький, О. М. Маханець, А. М. Грищук
Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича
вул. Коцюбинського, 2, Чернівці, UA–58012, Україна
(Отримано 18 жовтня 2006 р.)

Зроблено огляд теоретичних праць, що стосуються спектрів квазічастинок (електронів, дірок, екситонів) у напівпровідникових закритих та відкритих наногетеросистемах (класичних квантових точках, циліндричних квантових дротах). Дослідження виконано в моделі ефективних мас та прямокутних потенціялів. Ця модель, хоч і проста, але, крім того, що дає непогане узгодження з експериментом, придатна для застосування в теорії взаємодії електронів, дірок, екситонів із фононами в наногетеросистемах, де інші, детальніші моделі наштовхуються на математичні проблеми.

У статті докладно проаналізовано властивості спектрів електронів, дірок, екситонів у багатошарових сферичних квантових точках і циліндричних квантових дротах. Установлено фізичні причини подібностей і відмінностей спектрів квазічастинок у відкритих і закритих наногетеросистемах.

Ключові слова: сферична наногетеросистема, циліндричний квантовий дріт, енерґетичний спектр, хвильова функція.

PACS number(s): 73.21.Fg, 73.21.Hb, 73.21.La

I. СПЕКТРИ КВАЗІЧАСТИНОК У СКЛАДНИХ ВІДКРИТИХ І ЗАКРИТИХ СФЕРИЧНИХ НАНОГЕТЕРОСИСТЕМАХ

Теорія спектрів квазічастинок (електронів, дірок, екситонів, фононів) у простих і складних закритих квантових точках, квантових дротах, квантових ямах уже розроблена [1–4] і в основних рисах відповідає експериментальним дослідженням [5–8]. Що ж до відкритих наносистем, із яких квазічастинки можуть виходити і здійснювати вільний рух у зовнішньому середовищі, то теорія квазістаціонарних спектрів лише починає розвиватися [9–15]. Подібний стан справ і в теорії спектрів квазічастинок у комбінованих системах, які містять наноелементами складові різних розмірностей (квантові точки (КТ), квантові дроти (КД), квантові ями (КЯ)), — вона практично відсутня, хоча такі наносистеми створені вже давно.

Формально теорія спектрів квазічастинок у квантових точках почала розвиватися ще тоді, коли не були сформовані самі поняття КТ, КД, КЯ. Просто внаслідок розвитку квантової механіки були розв'язані класичні задачі Шредингера про спектр квазічастинки з масою m у безмежному чи скінченному (V) прямокутному потенціялі у сфері, циліндрі та прямокутному паралелепіпеді [16,17]. Уже тоді було встановлено, що в ділянці енерґій $E < V$ стаціонарний і дискретний спектри квазічастинок, хоча і значно відрізнялись між собою залежно від просторової форми об'єктів, у яких вони перебували, але й мали спільну рису: зі збільшенням об'єму цих об'єктів усі спектри зміщувались у бік менших енерґій.

Зразу ж після експериментального відкриття напівпровідникових КТ CdSe у склі у статті [5] і в багатьох наступних працях сформовано саме поняття напівпровідникової КТ як деякого просторового нанорозмірного утворення в середовищі. Невдовзі з'явилися перші теоретичні моделі, які описували узгоджені з експериментом спектри електронів, дірок, екситонів у простих сферичних КТ у середовищі.

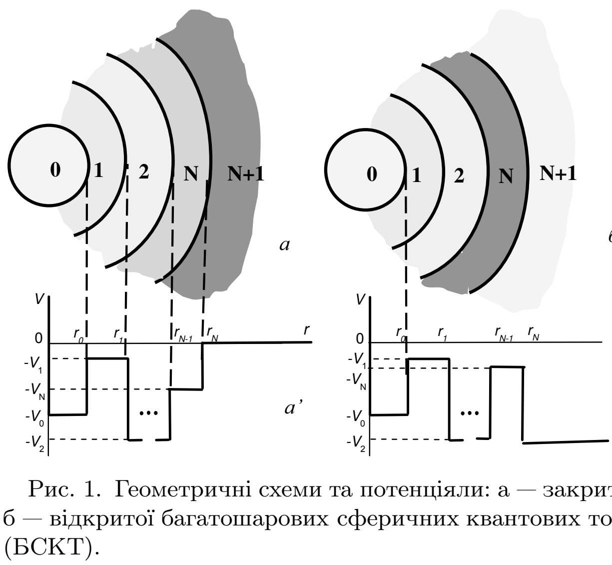

Рис. 1. Геометричні схеми та потенціяли: а — закритої і б — відкритої багатошарових сферичних квантових точок (БСКТ).

Серед різних мікро- і макроскопічних підходів достатньо дієвою виявилася модель ефективних мас і скінченних прямокутних потенціялів, яка для КТ не дуже малих розмірів давала змогу не лише знайти енерґетичний спектр, але й отримати хвильові функції в такому вигляді, що їх можна використати для розрахунку взаємодії електронів, дірок, екситонів з іншими квазічастинками, зокрема з фононами [18,19].

Розвиток експериментальних можливостей (зокрема метод йонного заміщення) привів до створення багатошарових КТ різної форми [7,8]. Одночасно почала розвиватись теорія спектрів квазічастинок у багатошарових КТ, КД, КЯ [1,11–15].

Спочатку була розроблена теорія спектрів електронів, дірок, екситонів і фононів для закритих наносистем (КТ, КД), а останніми роками і для відкритих теж. Наносистема вважається закритою або відкритою, якщо потенціял квазічастинки в зовнішньому середовищі найбільший або найменший стосовно потенціялів складових наносистеми (рис. 1).

Теорія спектрів і хвильових функцій електронів і дірок для складних багатошарових наносистем (закритого й відкритого типу) в моделі ефективної маси та прямокутного потенціялу будується так.

Розв'язується стаціонарне рівняння Шредінґера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\nabla\frac{1}{m(r)}\nabla+V(r)\right]\Psi_{nlm}(\mathbf{r})=E_{nl}\,\Psi_{nlm}(\mathbf{r}) \quad (1)$$

з відомими ефективними масами й потенціялами в кожному шарі наносистеми

$$V(r)=-\sum_{i=0}^{N+1}V_i\sigma_i(r),\quad m(r)=\sum_{i=0}^{N+1}m_i\sigma_i(r), \quad (2)$$

$$\sigma_i(r)=\begin{cases}1, & r_{i-1}\le r\le r_i\\ 0, & \text{в іншій ділянці}\end{cases}\;. \quad (3)$$

З урахуванням сферичної симетрії хвильову функцію зручно шукати у вигляді

$$\Psi_{nlm}(\mathbf{r})=R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi), \quad (4)$$

де $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ — сферичні функції, а для радіяльної функції $R_{n\ell}(r)$ отримуємо систему рівнянь

$$\left\{\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\left[\frac{m_i}{\hbar^2}(E+V_i)\right]+\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right\}R_\ell^i(r)=0,$$
$$i=0,1,\ldots,N+1\,. \quad (5)$$

За початок відліку енерґії вибираємо потенціяльну енерґію квазічастинки у зовнішньому середовищі. Тоді для $E<0$ загальний розв'язок системи (5) матиме вигляд

$$R_\ell^i(r)=A_i^\ell\,J_\ell(K_i\,r)+B_i^\ell\,N_\ell(K_i\,r), \quad (6)$$

$$i=0,1,\ldots,N+1,$$

де

$$J_\ell(K_ir)=\begin{cases}j_\ell(k_ir),\\ h_l^+(i\chi_ir),\end{cases}$$
$$N_\ell(K_ir)=\begin{cases}n_\ell(k_ir), & V_i\ge|E|,\\ h_l^-(i\chi_ir), & V_i\le|E|,\end{cases} \quad (7)$$
$$\ell=0,1,\ldots,\infty,\quad i=0,\ldots,N+1.$$

Тут $j_\ell,n_\ell,h_\ell^\pm$ — сферичні функції Бесселя, Ноймана та Ганкеля відповідно, а

$$K_i=\begin{cases}k_i=\hbar^{-1}\sqrt{2m_i(V_i-|E|)}\,, & V_i\ge|E|\\ \chi_i=\hbar^{-1}\sqrt{2m_i(|E|-V_i)}=ik_i\,, & V_i\le|E|\end{cases}\,. \quad (8)$$

Ураховуючи умови неперервности хвильової функції електрона чи дірки та густини потоку ймовірности на всіх межах

$$\left.\begin{aligned}&R_\ell^i(r)\Big|_{r=r_i}=R_\ell^{i+1}(r)\Big|_{r=r_i}\\ &\frac{1}{m_i}\frac{dR_\ell^i(r)}{dr}\Big|_{r=r_i}=\frac{1}{m_{i+1}}\frac{dR_\ell^{i+1}(r)}{dr}\Big|_{r=r_i}\end{aligned}\right\} \quad (9)$$
$$i=0,1,\ldots,N\,,$$

отримуємо дисперсійне рівняння для визначення спектра енерґій $E_{n\ell}$. У результаті розв'язування системи рівнянь (9) знаходимо стаціонарний спектр $E_{n\ell}$, а з урахуванням умови нормування

$$\iiint\psi^*_{nlm}(\mathbf{r})\psi_{n'l'm'}(\mathbf{r})r^2dr\sin\theta\,d\theta d\varphi=\delta_{nn'}\delta_{ll'}\delta_{mm'} \quad (10)$$

однозначно отримуємо весь набір хвильових функцій $\psi_{n\ell m}(\mathbf{r})$ дискретного спектра.

Для неперервного спектра для закритої системи ($E>0$) чи будь-якої ділянки спектра відкритої системи розв'язок тих же рівнянь, з тими ж граничними умовами знаходимо через матрицю розсіювання S. А саме:

$$R_{k\ell}^i=k_ia_i[h_\ell^+(k_ir)+S_\ell^{(i)}h_\ell^-(k_ir)]\,, \quad (11)$$
$$i=0,1,\ldots,N+1,$$

де $k_i=\hbar^{-1}\sqrt{2m_i(U_i+E)}$. Якщо ввести позначення

$$\begin{aligned}&\Phi_i(kr)=h_\ell^+(kr)+S_\ell^{(i)}h_\ell^-(kr),\\ &\bar\Phi_i(kr)=H_\ell^+(kr)+S_\ell^{(i)}H_\ell^-(kr),\\ &H_i^+(kr)=k\left(\tfrac{\ell}{kr}h_\ell^+(kr)-h_{\ell+1}^+(kr)\right),\\ &H_i^-(kr)=k\left(\tfrac{\ell}{kr}h_\ell^-(kr)-h_{\ell+1}^-(kr)\right),\end{aligned} \quad (12)$$

то, аналогічно до (9), отримаємо систему рівнянь

$$\left.\begin{aligned} k_{i-1}a_{i-1}\Phi_{i-1}(k_{i-1}r_{i-1}) - k_i a_i \Phi_i(k_i r_{i-1}) = 0 \\ \frac{1}{m_{i-1}}k_{i-1}a_{i-1}\bar{\Phi}_{i-1}(k_{i-1}r_{i-1}) - \frac{1}{m_i}k_i a_i \bar{\Phi}_i(k_i r_{i-1}) = 0 \end{aligned}\right\}$$

$$i = 1, 2, \ldots, N+1. \tag{13}$$

У результаті розв'язування цієї системи рівнянь знаходимо аналітичний вираз для S_ℓ-матриці

$$S_\ell^{(0)} = 1,$$

$$S_\ell^{(i+1)} = \frac{\bar{\Phi}_i(k_i r_i)h_\ell^+(k_{i+1}r_i) - \Phi_i(k_i r_i)H_\ell^+(k_{i+1}r_i)}{\bar{\Phi}_i(k_i r_i)h_\ell^-(k_{i+1}r_i) - \Phi_i(k_i r_i)H_\ell^-(k_{i+1}r_i)},$$

де

$$S_\ell(k) \equiv S_\ell^{N+1}(k) \tag{14}$$

— S-матриця.

Згідно із загальною теорією, полюси $S_\ell(k)$ у комплексній площині $k = k_1 + ik_2$ визначають енерґетичний спектр E_{nl} та тривалість життя $\tau_{n\ell}$ квазічастинки.

Оскільки у відкритій наносистемі квазічастинка може рухатись на безмежну відстань від її центра, то нормування радіяльної частини хвильової функції здійснюється на δ-функцію [20]

$$\int_0^\infty R_{lk}^*(r)R_{l'k'}(r)r^2 dr = \delta(k-k'). \tag{15}$$

Розраховуючи відповідні коефіцієнти

$$\begin{aligned} a_i &= \frac{k_{i+1}}{k_i}\frac{m_i}{m_{i-1}}\frac{h_\ell^+(k_{i+1}r_i) + S_\ell^{(i+1)}h_\ell^-(k_{i+1}r_i)}{h_\ell^+(k_i r_i) + S_\ell^{(i)}h_\ell^-(k_i r_i)}, \\ i &= 1, 2, \ldots, N, \\ a_{N+1} &= 1/\sqrt{2\pi} \end{aligned} \tag{16}$$

отримуємо хвильові функції електрона в неперервному спектрі відкритої наносистеми у вигляді

$$\begin{aligned} \Psi_{k\ell m}(\mathbf{r}) = \sum_{i=0}^{N+1} k_i a_i [h_\ell^+(k_i r) + S_\ell^{(i)} h_\ell^-(k_i r)] \\ \times Y_{\ell m}(\theta, \varphi)\sigma(r - r_i). \end{aligned} \tag{17}$$

Проаналізуймо тепер спектри квазічастинок (електронів, дірок, екситонів), одержані в результаті розрахунків за наведеною теорією для наносистем, отриманих на основі напівпровідників β-HgS та β-CdS у воді. Такі системи створені експериментально [7–8]. Фізичні параметри матеріялів наносистеми зведені в таблицю 1.

	$m_e(m_0)$	$m_h(m_0)$	a, Å	E_g, eV	V_e, eV	V_h, eV	ε_∞	ε_0
CdS	0.2	0.7	5.818	2.5	3.65	6.3	5.5	9.1
HgS	0.036	0.044	5.851	0.5	5.0	5.5	11.36	18.2
H_2O	1	∞	—	—	1.15	∞	1.78	81

Таблиця 1. Параметри складових наносистеми β-CdS/β-HgS/H_2O.

Розраховані залежності енерґетичних спектрів електронів, дірок та екситонів двошарової сферичної КТ CdS/HgS/H_2O наведено на рис. 2. З нього видно нові особливості, яких немає у простій одношаровій КТ. Вони такі.

Зі збільшенням товщини глибокої зовнішньої ями всі рівні електронів і дірок зміщуються в бік менших енерґій так, що в ділянці $0 \le E_{n\ell}^{e,h} \le V_0^{e,h}$ вони плавно спадають, а у ділянці $V_0^{e,h} \le E_{n\ell}^{e,h} \le V_2^{e,h}$ виникає ефект антикросинґу n-х і $n \pm 1$-х рівнів. Антикросінґи виникають там, де енерґетичні рівні обох не взаємодіючих ям мали б перетинатися, якби ями були не зв'язані бар'єром скінченних розмірів.

Важливим новим моментом щодо простої закритої КТ є також те, що в цій наносистемі електрони та дірки можуть перебувати як в одному, так і в різних шарах. Отже, є 4 типи просторової локалізації квазічастинок:

а) електрон і дірка в шарі (0);
б) електрон і дірка в шарі (1);
в) електрон у шарі (0), а дірка в шарі (1);
г) електрон у шарі (1), а дірка в шарі (0).

На рис. 3 наведено результат розрахунку залежности енерґії E_{10}^{10} локалізованого екситона від товщини шару HgS. Спостерігається непогане узгодження з експериментальними даними [3] при трьох значеннях Δ_{HgS}, відзначених колами на кривій E_{10}^{10}. Ці екситонні стани відповідають, як видно із залежностей E_{10}^e і E_{10}^h, такому просторовому розташуванню електронів і дірок, при якому дірка знаходиться в ядрі CdS (пряма ділянка E_{10}^h), а електрон — у шарі HgS (похила ділянка E_{10}^e). На кривій залежности екситонної енерґії від Δ_{HgS} спостерігаємо "горб" як прояв діркового антикросинґу, при якому дірка з ядра CdS переміщується в шар HgS. На жаль, експериментальні дані для цієї ділянки товщин у цитованій праці [3] відсутні.

У закритій тришаровій сферичній КТ із двома квантовими ямами (HgS/CdS/HgS/CdS), як видно з рис. 4, виникають такі нові особливості:

Антикросінґ існує в усій ділянці енерґій $E_{n\ell}^{e,h} \le V_0^{e,h}$, де стани стаціонарні.

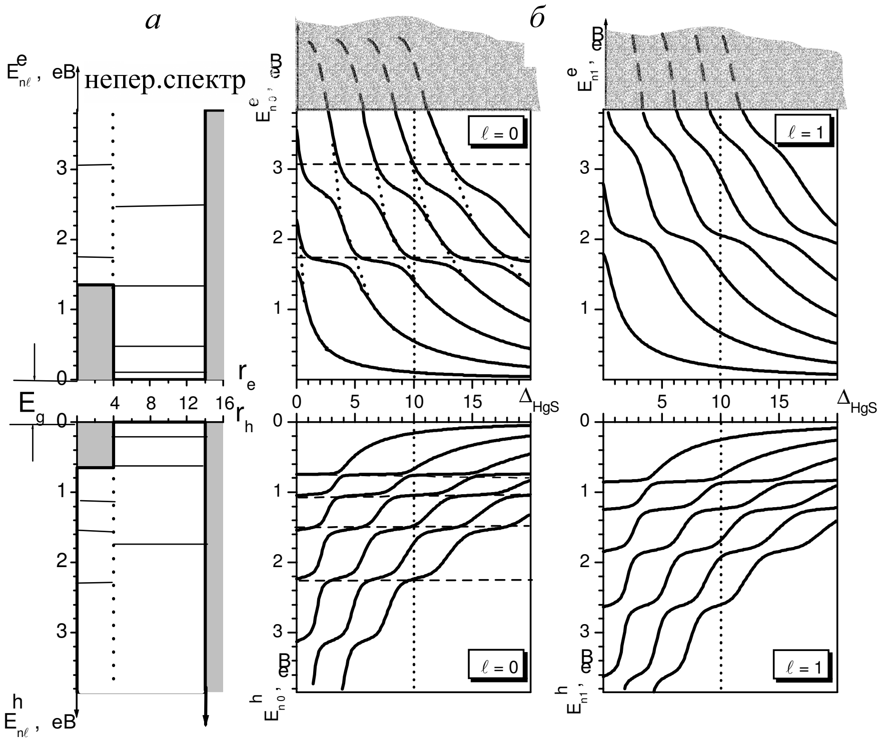

Рис. 2. а — геометрична та потенціяльна схеми БСКТ CdS/HgS/H_2O; б — залежність електронного та діркового спектрів від Δ_{HgS} при $r_0 = 5a_{CdS}$.

Як і у двошаровій системі, утворюються такі ж чотири типи локалізованих екситонних станів із різними просторовими розміщеннями електронів та дірок. Але у випадку великих товщин шару бар'єра (Δ_{CdS}) електрони й дірки далеко розділені у просторі, тому їх кулонівська взаємодія дуже мала, а дипольний момент великий.

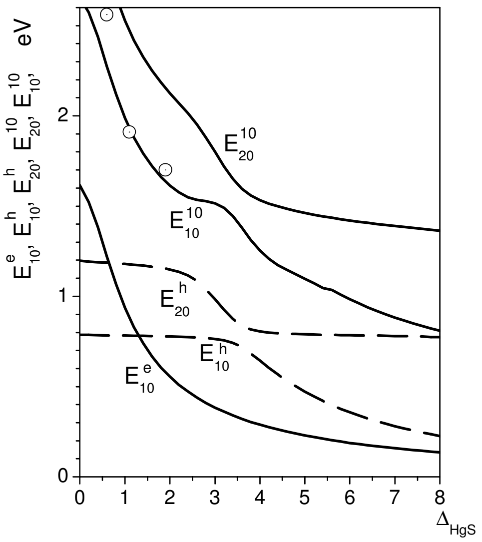

Рис. 3. Залежність енерґій електрона, дірки та екситона від товщини шару HgS при $r_0 = 4.7$ нм.

Дослідження закритих сферичних КТ із більшою кількістю шарів не вносить принципово нових особливостей в інформацію про спектр локалізованих квазічастинок.

Нові особливості у спектрах квазічастинок з'являються у відкритих сферичних квантових точках, оскільки можливість проникнення квазічастинок крізь потенціяльні бар'єри дозволяє їм рухатись на безмежну відстань від центра, що приводить до появи скінченної тривалости життя $\tau_{n\ell}$ у всіх станах з енерґією $E_{n\ell}$.

Розрахунок енерґій $E_{n\ell}$ та тривалости життя $\tau_{n\ell}$ виконано для однобар'єрної HgS/CdS/HgS (рис. 5) та двобар'єрної HgS/CdS/HgS/CdS/HgS сферичних квантових точок (рис. 6).

Характерний вигляд дійсної й уявної частин S-матриці, полюси якої у комплексній площині енерґій визначають енерґію ($E_{n\ell}$) і півширину ($\Gamma_{n\ell}$) енерґетичної зони, наведені на рис. 7. Півширина $\Gamma_{n\ell}$ пов'язана з тривалістю життя $\tau_{n\ell}$ квазічастинки у відповідному стані співвідношенням

$$\tau_{n\ell} = \hbar/\Gamma_{n\,\ell}. \tag{18}$$

Головні властивості спектра $E^e_{n\ell}$ та тривалости життя $\tau^e_{n\ell}$ електрона залежно від розмірів ядра-ями (HgS) при фіксованій товщині шару-бар'єра Δ(CdS) відкритої однобар'єрної системи видно з рис. 8. Ці властивості такі.

На відміну від закритих систем, де є дискретний спектр зі стаціонарними станами, у відкритих системах увесь спектр квазістаціонарний із двома ділянками енерґій, яким відповідають стани з великою і малою тривалістю життя $\tau_{n\ell}$ відповідно. У тонованій ділянці енерґій ($E < V^e_1$), нижче від потенціяльного бар'єра, стани є резонансними квазістаціонарними типу Брейта–Віґнера.

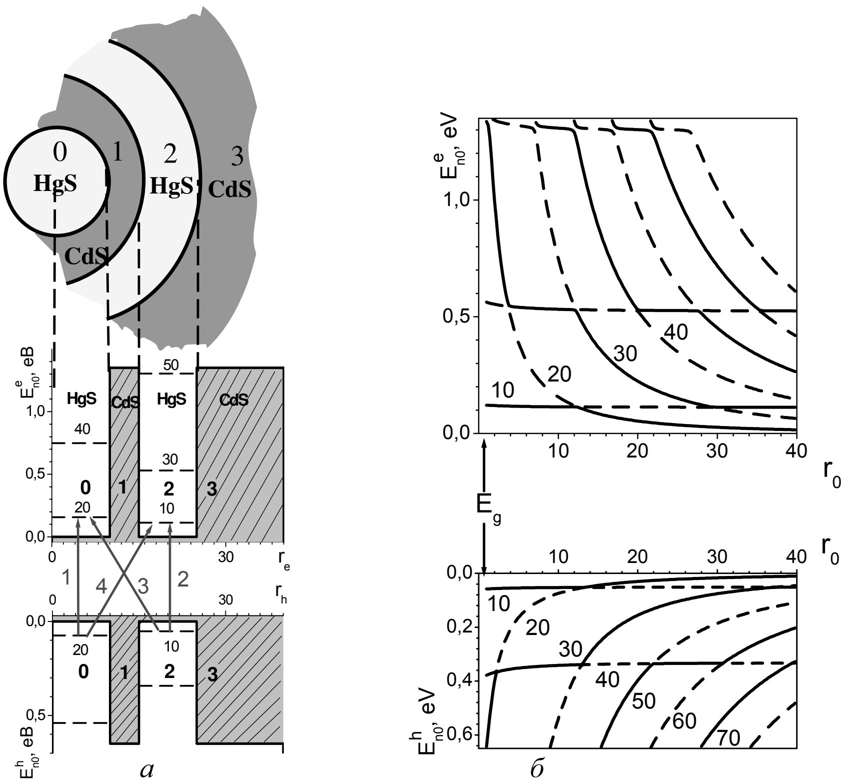

Рис. 4. а — геометрична та потенціяльна схема БСКТ HgS/CdS/HgS/CdS; б — залежність електронного та діркового спектрів від r_0 при заданій товщині бар'єра $\Delta_1 = 5a_{\mathrm{CdS}}$ та розмірі другої ями $\Delta_2 = 10a_{\mathrm{HgS}}$.

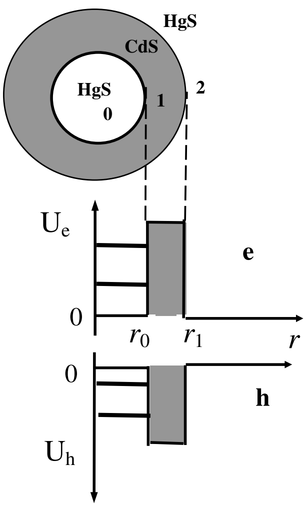

Рис. 5. Геометрична та потенціяльна схеми відкритої БСКТ HgS/CdS/HgS.

Зі збільшенням радіуса ями (r_0) величини енерґій $E_{n\ell}$ плавно зменшуються, а тривалість життя різко зростає. У нетонованій ділянці енерґій $E > V_1^e$ вище від потенціяльного бар'єра існують короткоживучі резонансні стани з малою тривалістю життя $\tau_{n\ell}^e$. Для них характерний антикросинґ у залежності $E_{n\ell}^e$ від r_0, що корелює з відповідними максимумами на залежностях $\tau_{n\ell}^e$ від r_0. Фізична причина цих особливостей у тому, що при таких значеннях r_0 здійснюється перерозподіл густини ймовірности знаходження квазічастинки з ядра (0) в оболонку (1) і навпаки. Тому збільшення r_0 приводить до "заглиблення" рівня під бар'єр, а отже, й до реґулярного збільшення тривалости життя. Проте коли квазічастинка потрапляє в ділянку r_0, де $E_{n\ell}^e$ ближче до горизонтальних ділянок енерґії, там вона з більшою ймовірністю перебуває в ділянці шару-бар'єра, звідки швидше проникає в зовнішнє середовище, а тому тривалість її життя тут трохи зменшується. Це й зумовлює відповідні максимуми на кривих залежности $\tau_{n\ell}^e$ від r_0 у нерезонансних станах.

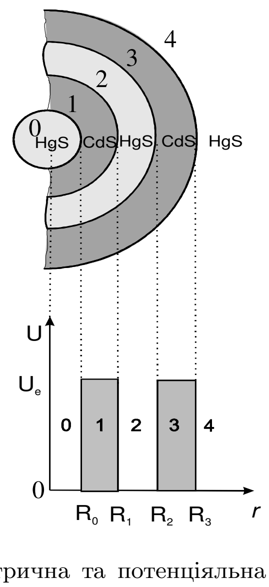

Рис. 6. Геометрична та потенціяльна схеми відкритої БСКТ HgS/CdS/HgS/CdS/HgS.

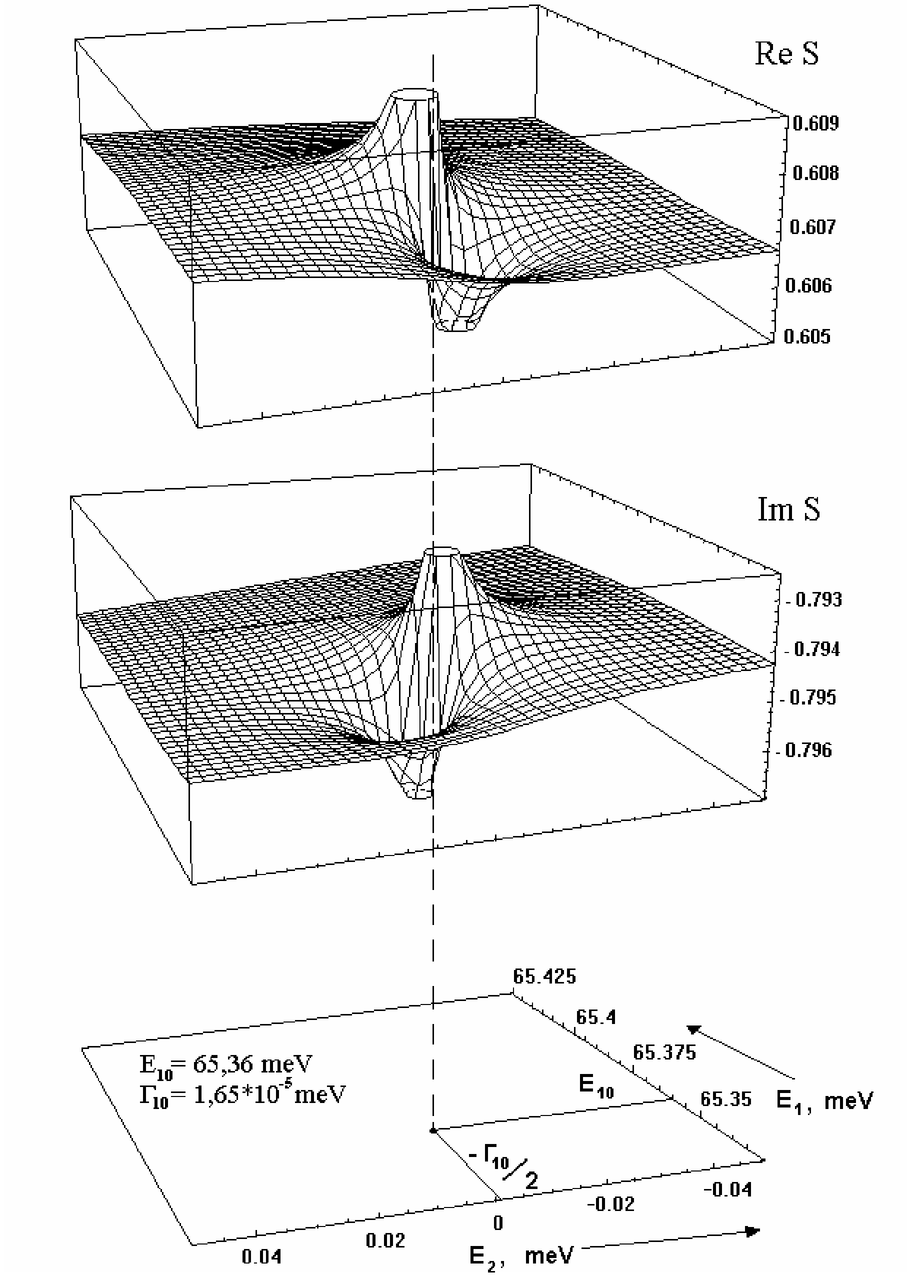

Рис. 7. Дійсна та уявна частини S-матриці в околі полюса $E = E_{10} - i\Gamma_{10}/2$.

Спектри й тривалість життя квазічастинки у двоямній і двобар'єрній відкритій сферичній КТ відрізняється від одноямної системи тим принципово новим моментом, що в цій наносистемі антикросинґ спостерігаються у всій ділянці енерґій (рис. 9а). Квазістаціонарні стани двобар'єрної наносистеми поділяються на довго- та короткоживучі. Стани, у яких квазічастинка локалізована у внутрішній ямі (ядрі), є більш довгоживучими, ніж стани, у яких вона в основному перебуває в зовнішній ямі. Оскільки із зовнішньої потенціяльної ями їй легше тунелювати через один потенціяльний бар'єр, то вона може за менший час вийти з наносистеми, рухаючись на нескінченну відстань від центра.

На рис. 10, 11 наведено залежності густини радіяльної ймовірности знаходження квазічастинок (ρ_{10}^{e}, ρ_{10}^{h}) від r при кількох значеннях r_0. З рисунка видно, як зі збільшенням r_0 електрон та дірка поступово переходять із другої у першу яму (переміщується максимальне значення густини ймовірности ρ). При цьому ρ_{10}^{e} у зовнішньому середовищі має осцилюючий характер.

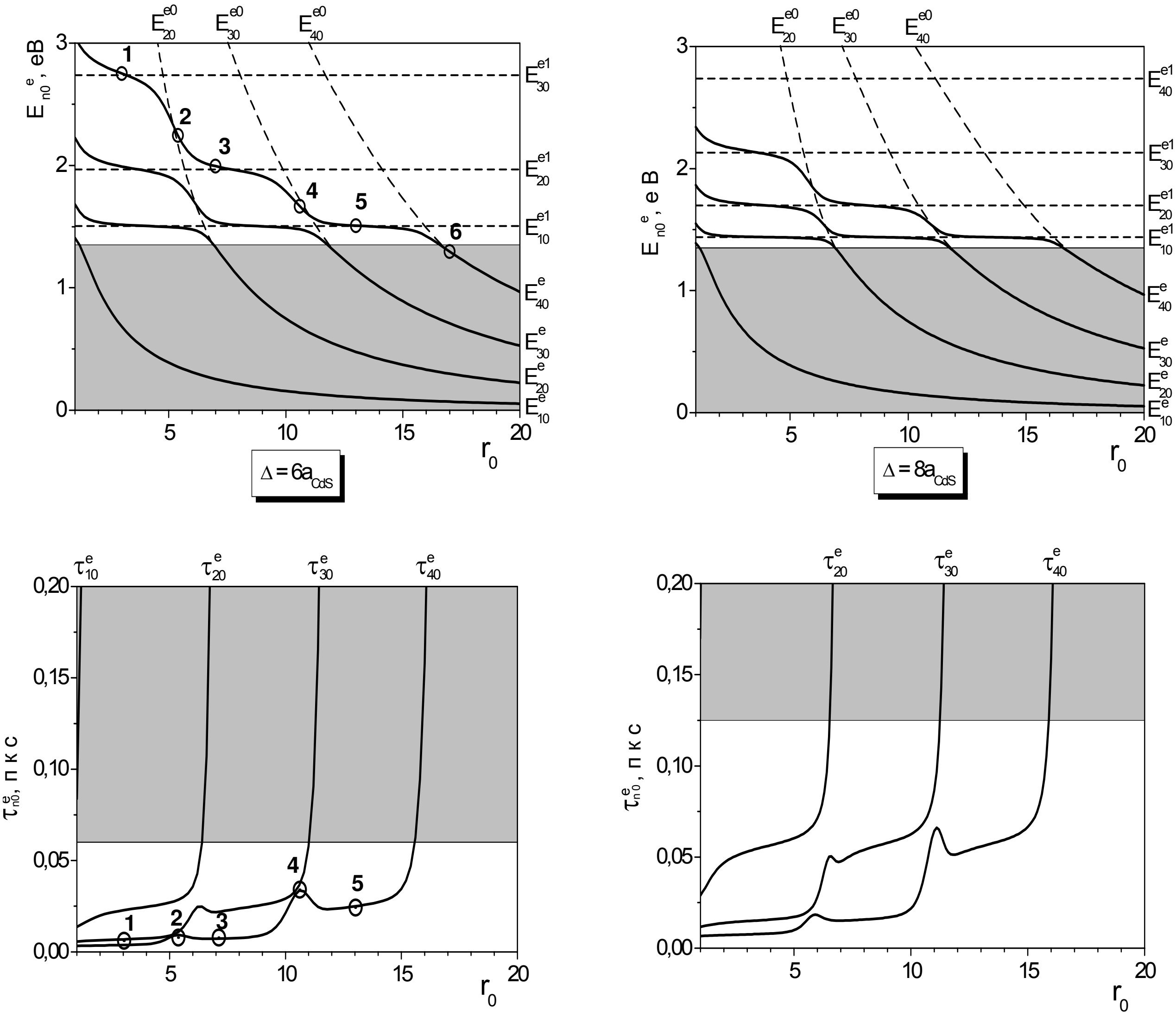

Рис. 8. Залежності енерґетичних рівнів і тривалости життя електрона від розміру ядра для різних розмірів шару-бар'єра Δ при $\ell = 0$.

На рис. 12 наведена схема потенціяльної енергії електрона та положення резонансних рівнів E^{e}_{n0}, а на рис. 13 — залежність τ^{e}_{n0}від товщини першого бар'єра Δ_1. Як і слід було чекати, положення рівнів E^{e}_{n0} майже не залежить від величини Δ_1, тому вони зображені відповідними лініями на схемі, а тривалість життя у станах (10, 30, 50), де квазічастинка перебуває у другій ямі, практично не залежить від Δ_1, при цьому τ^{e}_{n0} у станах (20, 40), де квазічастинка перебуває у першій ямі, експоненційно зростають зі збільшенням Δ_1.

Оскільки спектри та тривалість життя дірок мають такі ж властивості, як і електронів, то, відповідно, й екситонні стани в цій простій відкритій СКТ (рис. 5) є коротко- і довгоживучими резонансними станами типу Брейта–Віґнера (рис. 14).

Залежність усіх $E^{n\ell}_{n'\ell'}$ і $\tau^{n\ell}_{n'\ell'}$ від розміру ядра r_0 є складною (рис. 14). Усі $E^{n\ell}_{n'\ell'}$ містять пологі та спадні ділянки, які відповідають малим і великим значенням $\tau^{n\ell}_{n'\ell'}$.

Пологим ділянкам $E^{n\ell}_{n'\ell'}(r_0)$ відповідають стани екситонів, у яких електрон та дірка, в основному, перебувають у зовнішньому шарі-ямі (2), внаслідок чого для виходу в зовнішнє середовище екситон долає лише зовнішній шар-бар'єр (3) за короткий проміжок часу (малі $\tau^{n\ell}_{n'\ell'}$).

Спадним ділянкам $E^{n\ell}_{n'\ell'}(r_0)$ відповідають стани екситонів, у яких електрон та дірка, в основному, перебувають у внутрішньому ядрі-ямі (0), внаслідок чого для виходу в зовнішнє середовище екситон долає два шари-бар'єри за тривалий проміжок часу (великі $\tau^{n\ell}_{n'\ell'}$).

На відміну від простої СКТ, у БСКТ ієрархія енерґетичних рівнів і тривалости життя квазічастинок у всіх станах складним чином залежить від геометричних і фізичних параметрів складових наносистеми, тому кінцеві висновки залежать від структури БСКТ.

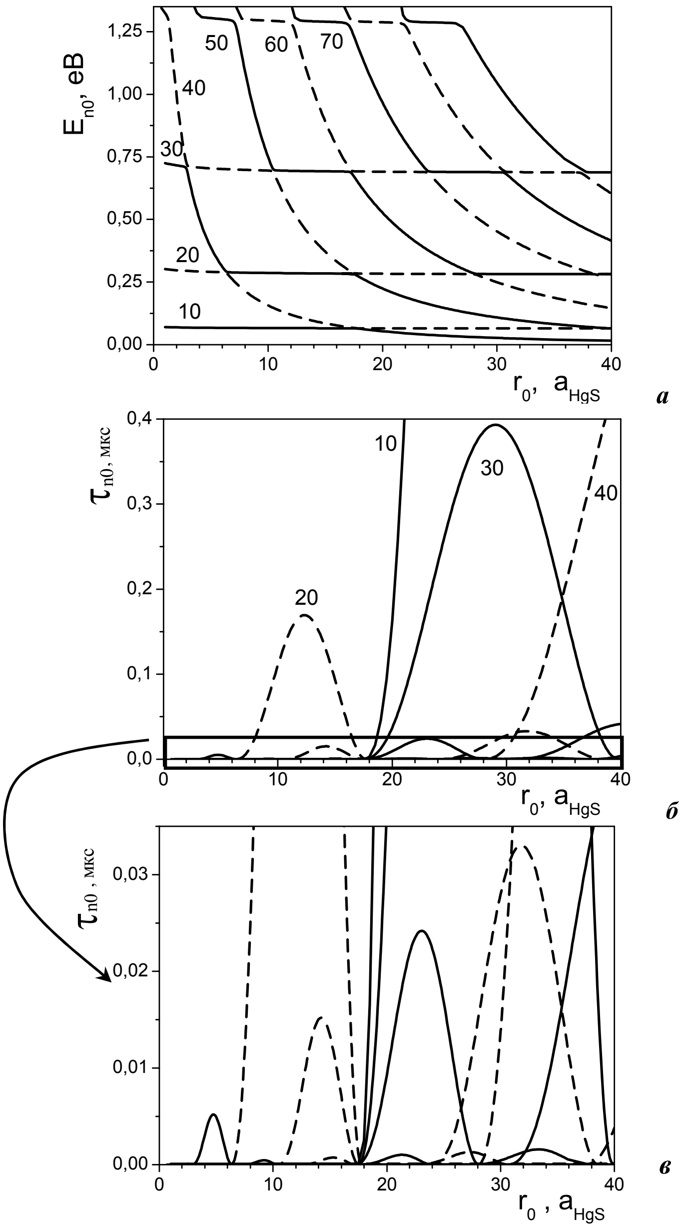

Рис. 9. Залежність енерґії (E_{n0}) а) та тривалости життя (τ_{n0}) б), в) квазістаціонарних станів від радіуса (r_0) двобар'єрної відкритої СКТ.

II. СПЕКТРИ КВАЗІЧАСТИНОК У БАГАТОШАРОВИХ ЦИЛІНДРИЧНИХ КВАНТОВИХ ДРОТАХ

Теорія спектрів і хвильових функцій електронів, дірок, екситонів у багатошарових циліндричних квантових дротах (БЦКД) у моделі прямокутних потенціяльних ям й ефективних мас подібна до теорії БСКТ. Тут також існують відкриті та закриті системи. Аналітичний розв'язок рівняння Шредінґера із застосуванням теорії S-матриці й числові розрахунки за допомогою ЕОМ дають змогу розраховувати стаціонарні і квазістаціонарні спектри та знайти хвильові функції електронів, дірок, екситонів у складних КД. Усі характерні риси спектрів нульвимірних БСКТ властиві й одновимірним БЦКД. Нові особливості, які отримуються для квазічастинок, у них такі:

1. Аксіяльна симетрія й нескінченність КД приводить до того, що в цій системі квазічастинки характеризуються одновимірним квазіімпульсом k і двома квантовими числами n_ρ, m.

2. Унаслідок того, що ефективні маси електронів і дірок у різних шарах наносистеми різні, то при русі електронів і дірок у багатошаровому квантовому дроті виникає скорельована ефективна маса $\mu_{\mathrm{e,h}}$.

3. Оскільки S-матриця залежить від одновимірного квазіімпульсу, то і спектр квазістаціонарних станів $E_{n_\rho m}(k)$, а отже, й тривалість життя $\tau_{n_\rho m}(k)$ виявляються залежними від величини квазіімпульсу. Причому, відповідно до фізичних міркувань, чим більший квазіімпульс, тим менша тривалість життя квазічастинки в цьому стані. Цей ефект можна використати для просторової сепарації квазічастинок за швидкостями.

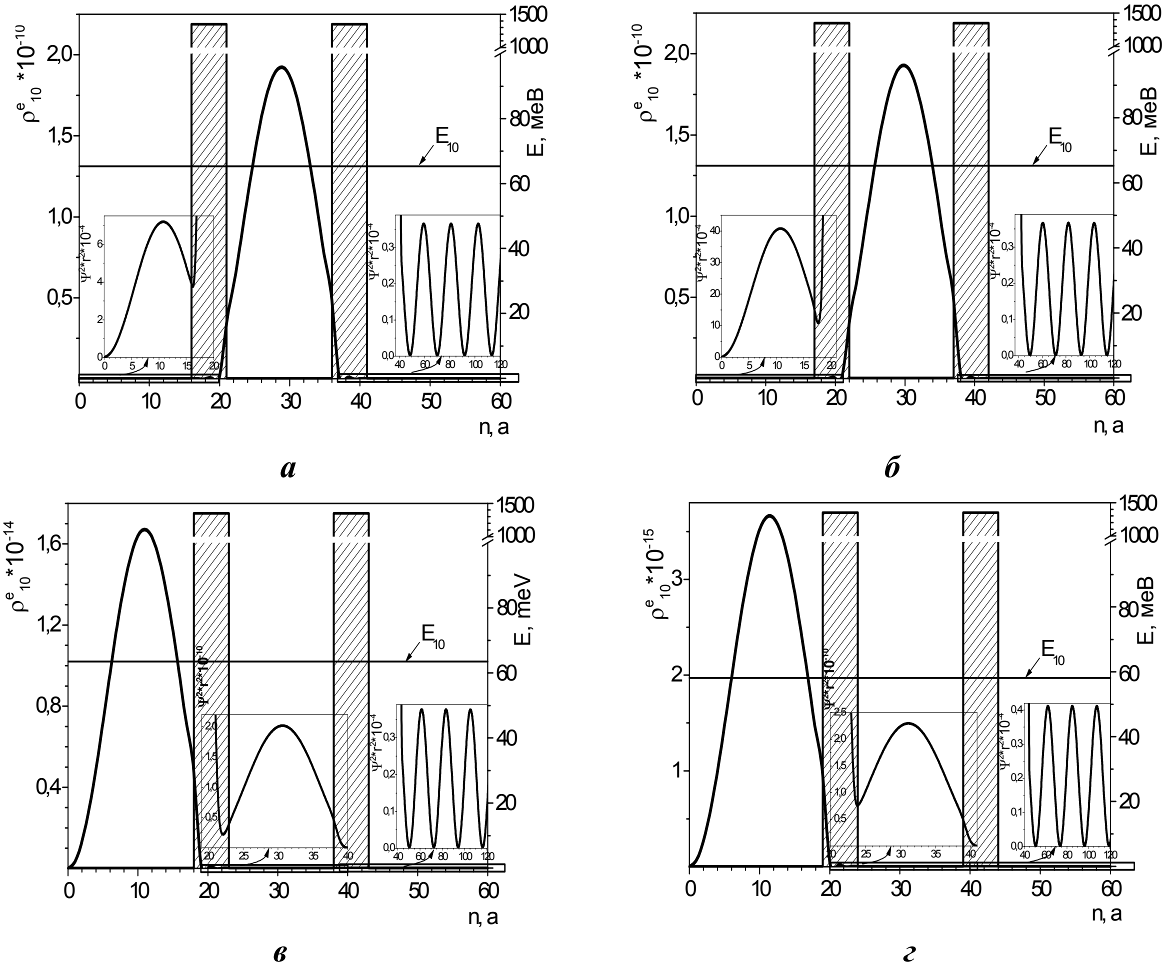

Рис. 10. Еволюція $\rho^{e}_{10}(r)$ залежно від радіуса ядра $r_0 = 16a_{\mathrm{HgS}}$ (а), $17a_{\mathrm{HgS}}$ (б), $18a_{\mathrm{HgS}}$ (в) і $19a_{\mathrm{HgS}}$ (г).

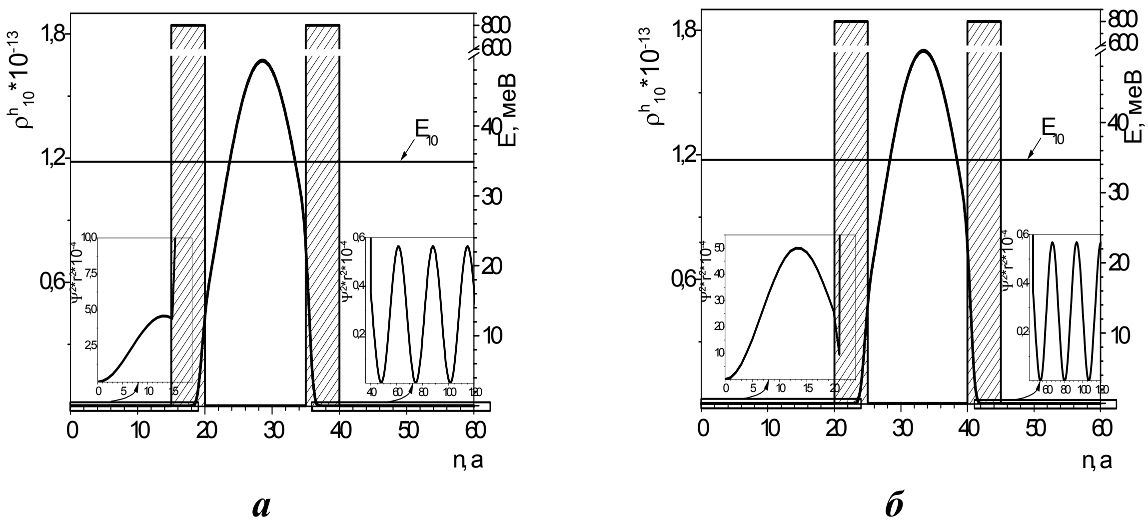

Рис. 11. Еволюція $\rho^{h}_{10}(r)$ залежно від радіуса ядра $r_0 = 15a_{\mathrm{HgS}}$ (а), $20a_{\mathrm{HgS}}$ (б).

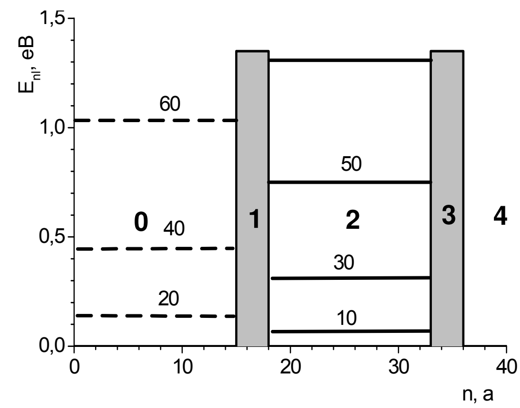

Рис. 12. Потенціяльна схема й енерґетичний спектр електрона у відкритій БСКТ з двома потенціяльними ямами й бар'єрами.

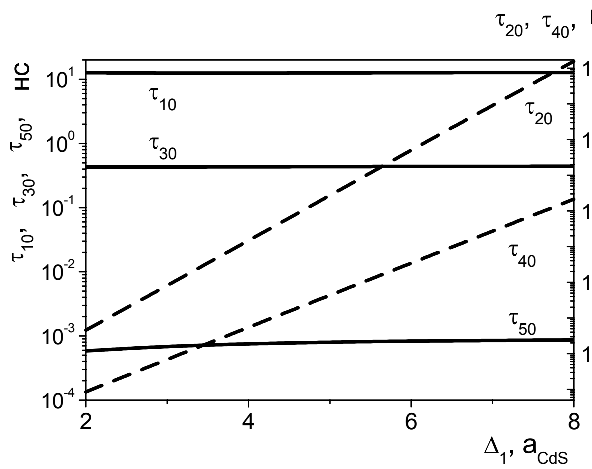

Рис. 13. Залежність тривалости життя квазістаціонарних станів електрона від товщини першого бар'єра відкритої БСКТ з двома потенціяльними ямами й бар'єрами.

Теорія електронного спектра в БЦКД будується аналогічно до БСКТ. У тій же моделі прямокутних потенціялів й ефективних мас задача про спектр і хвильові функції розв'язується так.

Рівняння Шредингера для БЦКД (рис. 15) буде таким:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2}\nabla\frac{1}{\mu\left(\rho\right)}\nabla+U\left(\rho\right)\right)\Psi\left(\mathbf{r}\right)=E\Psi\left(\mathbf{r}\right), \tag{19}$$

де

$$\mu(\rho)=\begin{cases}\mu_0, & \rho<\rho_0; \quad \rho_1<\rho,\\ \mu_1, & \rho_0\le\rho\le\rho_1,\end{cases} \tag{20}$$

$$U(\rho)=\begin{cases}0, & \rho<\rho_0; \quad \rho_1<\rho,\\ U, & \rho_0\le\rho\le\rho_1.\end{cases} \tag{21}$$

З урахуванням аксіяльної симетрії розв'язок рівняння (19) шукаємо у вигляді

$$\Psi\left(\rho,\,\varphi,\,z\right)=\frac{1}{\sqrt{L}}R\left(\rho\right)\ e^{im\varphi}\,e^{ikz}, \tag{22}$$

$$m=0,\pm1,\pm2,\ldots, \tag{23}$$

де $R(\rho)$ — радіяльна складова хвильової функції.

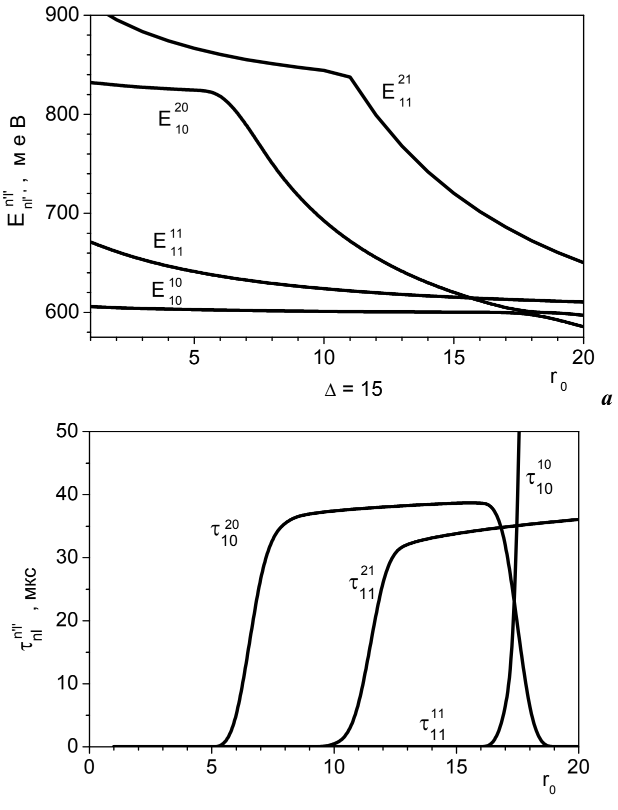

Рис. 14. Залежності енерґій ($E_{n\ell}$) (а) та тривалости життя ($\tau_{n\ell}$) (б) екситона від радіуса (r_0) квантової точки

У результаті підстановки (22) в (19) отримуємо рівняння для радіяльної хвильової функції

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\frac{\rho}{\mu\left(\rho\right)}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)-\frac{m^2}{\rho^2\mu\left(\rho\right)}-\frac{k^2}{\mu\left(\rho\right)}\right]\right.$$
$$\left.+U\left(\rho\right)-E\right\}R_{m,k}\left(\rho\right)=0. \tag{24}$$

Із рівняння (24) видно, що магнетне квантове число m і квазіімпульс k виступають його параметрами, а отже, від них залежать і радіяльні хвильові функції функції $R_{m,k}(\rho)$, які, враховуючи (21), слід шукати так:

$$R_{m,k}(\rho)=\begin{cases}R^0_{mk}(\rho), & \rho<\rho_0,\\ R^1_{mk}(\rho), & \rho_0\le\rho\le\rho_1\\ R^0_{mk}(\rho), & \rho>\rho_1\end{cases}. \tag{25}$$

Підстановка (25) у (24) приводить до трьох однотипних рівнянь

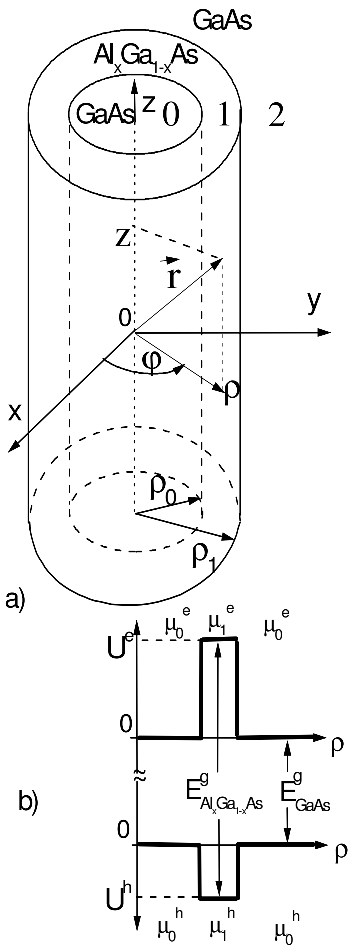

Рис. 15. Геометрична схема (а) і схема потенціяльної енерґії електрона й дірки (б) у відкритому БЦКД.

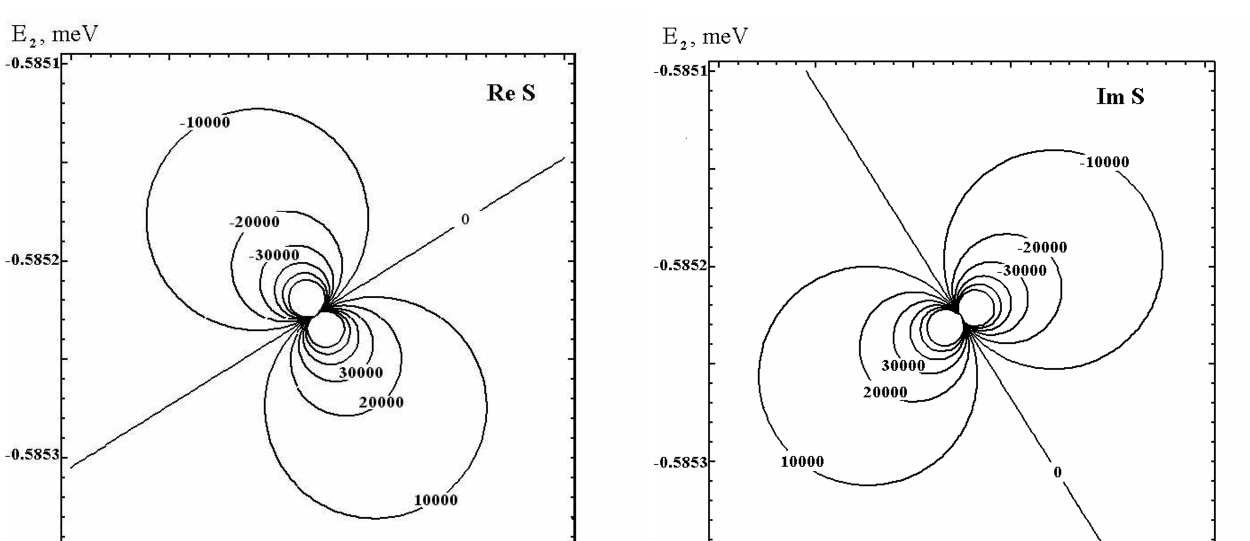

Рис. 16. Топограма функцій Re(S) (а) та Im(S) (б) у комплексній площині $E = E_1 + iE_2$.

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{m^2}{\rho^2}+\frac{2\mu_i}{\hbar^2}\left(E-U_i-\frac{\hbar^2k^2}{2\mu_i}\right)\right]R^i_{mk}(\rho)=0\,,\qquad (i=0,1,2), \tag{26}$$

розв'язками яких є лінійні комбінації функцій Ганкеля від різних арґументів

$$R_{mk}=\begin{cases} R^0_{mk}(\rho)=\mathrm{A}^{(0)}_m[H^-_m(\chi_0\rho)+H^+_m(\chi_0\rho)]\,, & \rho<\rho_0\\ R^1_{mk}(\rho)=\mathrm{A}^{(1)}_m\left[H^-_m(i\chi_1\rho)+S^1_{mk}(E)\;H^+_m(i\chi_1\rho)\right], & \rho_0\le\rho\le\rho_1\\ R^2_{mk}(\rho)=\mathrm{A}^{(2)}_m[H^-_m(\chi_0\rho)+S_{mk}(E)\;H^+_m(\chi_0\rho)]\,, & \rho>\rho_1,\end{cases} \tag{27}$$

де

$$\chi_0=\sqrt{\frac{2\mu_0}{\hbar^2}E-k^2},\qquad \chi_1=\sqrt{\frac{2\mu_1}{\hbar^2}(U-E)+k^2}. \tag{28}$$

Усі коефіцієнти A та обидві S-матриці (S^1_{mk}, S_{mk}) однозначно визначаються умовами неперервності хвильової функції та потоку густини ймовірності на обох межах поділу середовищ, а також умовою нормування.

У результаті розрахунків для $S_{mk}(E)$ отримуємо складний аналітичний вираз. Досліджуючи за допомогою ЕОМ положення полюсів S-матриці в комплексній площині енерґій (рис. 16), отримуємо енерґії $E^e_{nm}(k)$ та тривалість життя $\tau^e_{nm}(k)$ квазістаціонарних станів електрона.

На рис. 17 і 18 наведено результати розрахунку енерґій ($E^e_{nm}(k)$) і тривалости життя ($\tau^e_{nm}(k)$) електронів у квазістаціонарних станах БЦКД GaAs/Al$_x$Ga$_{1-x}$As/GaAs, як функцій поздовжнього квазіімпульсу (k) при $\rho_0=15\,a_{\mathrm{GaAs}}$, $\rho_1-\rho_0=5a$, $m=0,1$ та при фіксованих значеннях процентного вмісту Al $x=0.2,0.4$. Там же штриховими лініями зображені графіки законів дисперсії електрона в масивних напівпровідникових кристалах Al$_x$Ga$_{1-x}$As і GaAs, які є складниками досліджуваного БЦКД

$$E^e_{\mathrm{Al}_x\mathrm{Ga}_{1-x}\mathrm{As}}=\frac{\hbar^2k^2}{2\mu_e},\qquad E^e_{\mathrm{GaAs}}=U^e+\frac{\hbar^2k^2}{2\mu_e}. \tag{29}$$

Як видно з рис. 17, криві $E_{\mathrm{GaAs}}(k)$ і $E_{\mathrm{Al}_x\mathrm{Ga}_{1-x}\mathrm{As}}(k)$ поділяють площину (E,k) на три ділянки: I — ділянка ($E<E_{\mathrm{GaAs}}(k)$), у якій S-матриця не має полюсів, і, відповідно, квазічастинки не мають тут жодних станів; II — ділянка ($E_{\mathrm{GaAs}}(k)<E<E_{\mathrm{Al}_x\mathrm{Ga}_{1-x}\mathrm{As}}(k)$), у якій при певних значеннях квазіімпульсу k S-матриця має полюси в площині комплексної енерґії $\tilde{E}=E-i\Gamma/2$ з відмінними від нуля дійсною (E) й уявною ($\Gamma/2$) частинами, які визначають резонансну енерґію і тривалість життя $\tau\sim\Gamma^{-1}$ квазічастинки в цьому квазістаціонарному стані; III — ділянка ($E>E_{\mathrm{Al}_x\mathrm{Ga}_{1-x}\mathrm{As}}(k)$), у якій квазічастинки перебувають у квазістаціонарних станах континуального спектра енерґій ($|\mathrm{S}|=1$).

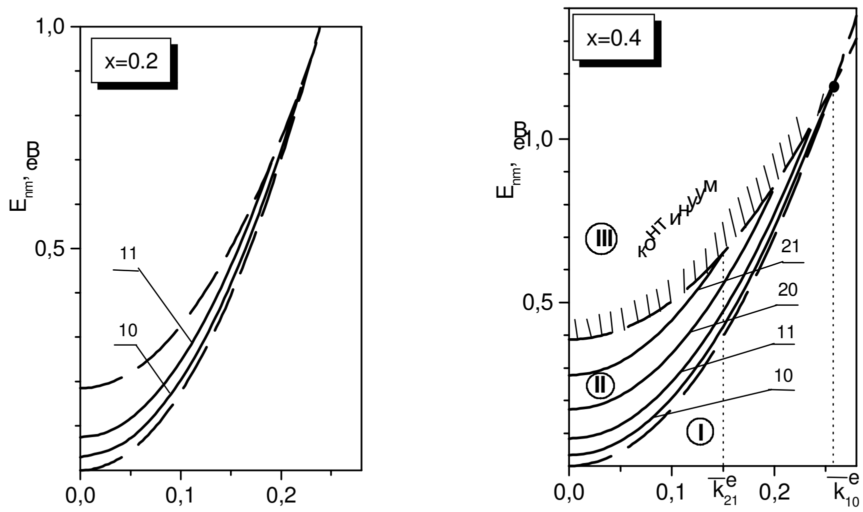

Рис. 17. Залежності резонансних енерґій електрона (E^e_{nm}) від поздовжнього квазіімпульсу k при різних значеннях вмісту Al(x) ($\rho_0=15a_{\mathrm{GaAs}}$, $\rho_1-\rho_0=5a$) у наносистемі GaAs/Al$_x$Ga$_{1-x}$As/GaAs.

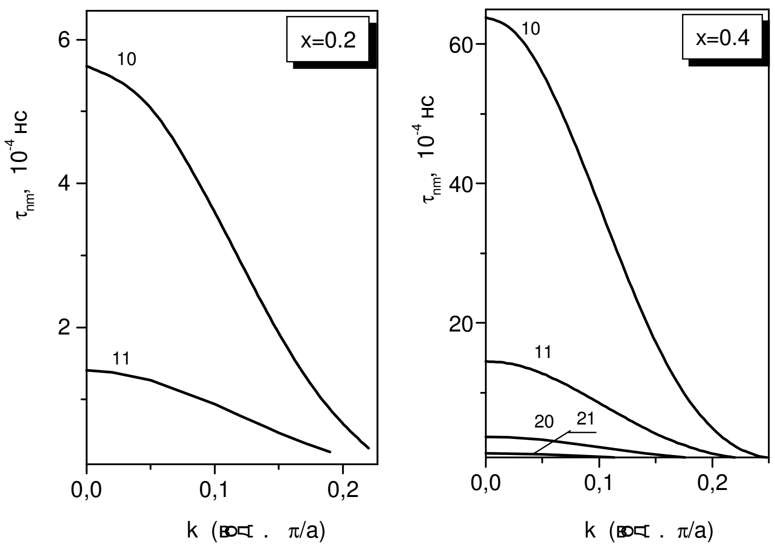

Рис. 18. Залежності тривалости життя (τ^e_{nm}) від поздовжнього квазіімпульсу k при різних значеннях процентного умісту Al(x) у наносистемі GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs.

Детально проаналізуємо квазістаціонарні стани електронів у найцікавішій ділянці II. Як видно, тут утворюється деяка кількість квазістаціонарних станів, перебуваючи в яких, електрон може здійснювати рух уздовж внутрішнього циліндра БЦКД з квазіімпульсом k. Кількість зон визначається геометричними розмірами СЦКД, ефективною масою й потенціяльною енерґією квазічастинки. Головні особливості $E^{e,h}_{nm}(k)$ такі: залежність енерґії квазічастинки у всіх резонансних станах досить добре апроксимується квадратичним законом дисперсії

$$E^e_{nm}(k) = E^e_{nm} + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu^e_{nm}},$$

де E^e_{nm} визначаються розв'язками відповідних дисперсійних рівнянь при $k = 0$, а величини скорельованих ефективних мас електронів μ^e_{nm} дуже близькі до відповідних ефективних мас в Al_xGa_{1-x}As (Таблиця 2).

x	0.2		0.4			
nm	10	11	10	11	20	21
N	1	2	1	2	3	4
μ^e_{nm}	0.0672	0.0684	0.0678	0.0686	0.0692	0.0703

Таблиця 2. Значення скорельованої ефективної маси електронів.

Зі збільшенням номера одновимірної зони (N) скорельована ефективна маса квазічастинки дещо зростає, оскільки при цьому зменшується "ефективна висота" потенціяльного бар'єра і квазічастинка все більше проникає в GaAs, де її ефективна маса більша, ніж у Al_xGa_{1-x}As.

Усі зони резонансних енерґій квазічастинок ($E^e_{nm}(k)$) характеризуються максимальним значенням поздовжнього квазіімпульсу $\bar{k}^e_{nm}$. Значення $\bar{k}^e_{nm}$ визначаються з рівняння

$$E^e_{nm}(\bar{k}) = U^e + \frac{\hbar^2\left(\bar{k}^\ell_{nm}\right)^2}{2\mu^e_1}, \tag{30}$$

причому, очевидно, що нижчим квазістаціонарним рівням відповідають більші значення $\bar{k}^e_{nm}$. Зі збільшенням концентрації x зростає висота потенціяльного бар'єра U^e, тому, як видно з (30), зростає максимальне значення квазіімпульсу електронів.

Важливою особливістю резонансного спектра квазічастинки у відкритому БЦКД є те, що тривалість життя ($\tau^{e,h}_{nm}$) квазічастинки в стані (nm) швидко зменшується зі збільшенням поздовжнього квазіімпульсу. Наприклад, як видно з рис. 18, тривалість життя електрона в стані $|10\rangle$ при $k = 0.25$ на два порядки менша, ніж при $k = 0$. Фізично це зрозуміло, оскільки зі збільшенням k зменшується "ефективна висота" потенціяльного бар'єра і квазічастинка з більшою ймовірністю проникає в забар'єрний простір БЦКД. Із цієї ж причини різко зменшується тривалість життя квазічастинок зі збільшенням енерґій квазістаціонарних станів. Такі особливості резонансних спектрів, як видно з рис. 18, яскравіше проявляються при більших значеннях концентрації x, оскільки їм відповідають більші значення висоти потенціяльних бар'єрів.

У зв'язку зі зазначеною особливістю відкритого БЦКД такі наносистеми можна використовувати як сепаратори квазічастинок за квазіімпульсами, тобто відсіювати (крізь бар'єр) швидкі і пропускати повільні квазічастинки, які рухаються у внутрішньому циліндрі — ямі.

На рис. 19 наведено результати розрахунку залежностей енерґій E^e_{nm} та тривалости життя τ^e_{nm} електрона від товщини матеріялу-бар'єра при $k = 0$.

З рисунка видно, що зі збільшенням товщини бар'єра тривалість життя електрона експоненційно збільшується в усіх станах. У резонансних квазістаціонарних станах з енерґією, близькою до висоти потенціяльного бар'єра, помітно, що ця залежність стає дещо слабшою від експоненційної. При фіксованій товщині бар'єра тривалість життя тим більша, чим менша енерґія відповідного стану. Це зрозуміло з фізичних міркувань, оскільки зменшення енерґії квазічастинки в певному стані еквівалентне збільшенню "ефективної потужности бар'єра", що перешкоджає її проникненню крізь бар'єр, а отже, збільшує тривалість життя у квантовій ямі.

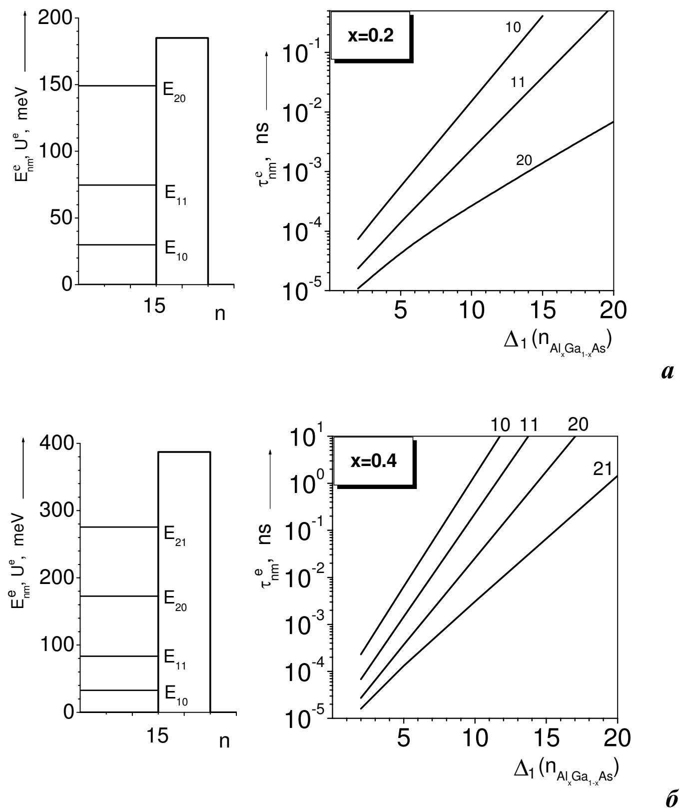

Рис. 19. Схеми положень резонансних енерґетичних рівнів E^e_{nm} та залежности тривалости життя τ^e_{nm} від товщини бар'єра Δ_1 при $n_{\mathrm{GaAS}} = 15$, $x = 0.2$ та $x = 0.4$.

III. ВИСНОВКИ

Загальні висновки такі. Модель ефективних мас і прямокутних потенціялів задовільно описує спектри електронів, дірок і екситонів як у закритих, так і у відкритих БСКТ та БЦКД. Отримані хвильові функції квазічастинок у закритих наносистемах є повними й тому придатними для побудови теорії взаємодії цих квазічасток із фононним і фотонним полем. Що ж стосується відкритих наноситем, то використання S-матричного методу добре визначає резонансні енерґії та тривалість життя у квазістаціонарних станах електрона й дірки, але цю теорію не можна безпосередньо застосувати до вивчення квазістаціонарних станів екситонів, а надто для вивчення взаємодії цих квазічастинок із фононним полем у наногетеросистемах. Остання задача є актуальною, і дослідження в цьому напрямку лише розпочинаються.

[1] M. Tkach, V. Holovatsky, O. Voitsekhivska, M. Mikhalyova, *Narrow Gap Semiconductors. Proceeding of the Ninth International Conference. Institute of Physics* (Humboldt University, Berlin, 2000).

[2] M. Tkach, V. Holovatsky, O. Voitsekhivska, M. Mykhalyova, R. Fartushynsky, Phys. Status Solidi B **225**, 331 (2001).

[3] Н. В. Ткач, В. А. Головацкий, О. М. Войцехивская, М. Я. Михальова, Р. Б. Фартушинский, Физ. тверд. тела **43**, 1315 (2001).

[4] М. В. Ткач, В. А. Головацький, О. М. Войцехівська, М. Я. Мінькова, Укр. фіз. журн. **44**, 385 (1999).

[5] А. И. Екимов, А. А. Онущенко, Физ. техн. полупр. **16**, 1215 (1982).

[6] Ал. Л. Эфрос, А. Л. Эфрос, Физ. техн. полупр. **16**, 1209 (1982).

[7] D. Schooss, A. Mews, A. Eychmuller, H. Weller, Phys. Rev. B **49**, 17072 (1994).

[8] A. Mews, A. V. Kadavanich, U. Banin, A. P. Alivisatos Phys. Rev. B **53**, 13242 (1996).

[9] R. Buczko, F. Bassani, Phys. Rev. B **54**, 2667 (1996).

[10] Н. В. Ткач, В. А. Головацкий, Физ. тверд. тела **41**,

2081 (1999).

[11] Н. В. Ткач, В. А. Головацкий, О. Н. Войцеховская, Физ. техн. полупр. **34**, 602 (2000).

[12] Н. В. Ткач, В. А. Головацкий, Физ. тверд. тела **43**, 350 (2001).

[13] M. Tkach, V. Holovatsky, O. Voitsekhivska, Physica E **11**, 17 (2001).

[14] M. Tkach, V. Holovatsky, O. Voitsekhivska, Ya. Berezovsky, Ukr. Phys. J. **46**, 859 (2001).

[15] Н. В. Ткач, В. А. Головацкий, Я. М. Березовский, Изв. Акад. наук РФ, сер. физ. **68**, 120 (2004).

[16] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория* (Наука, Москва 1989).

[17] І. О. Вакарчук, *Квантова механіка* (Львівський державний університет ім. І. Франка, Львів, 1998).

[18] S. N. Klimin, E. P. Pokatilov, V. M. Fomin, Phys. Status Solidi B **184**, 373 (1994).

[19] M. C. Klein, F. Hache, D. Ricard, C. Flytzanis, Phys. Rev. B **42**, 11143 (1990).

[20] А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике* (Наука, Москва, 1971).

QUASIPARTICLES SPECTRA IN MULTISHELL SEMICONDUCTOR NANOHETEROSYSTEMS

M. V. Tkach, O. M. Voitsekhivska, V. A. Holovatsky, O. M. Makhanets, A. M. Gryschuk
Fedkovych Chernivtsi National University,
2, Kotsyubinskoho St., Chernivtsi, UA–58012, Ukraine
e-mail:theorphys@chnu.cv.ua

A general overview of the papers about the theory of quasiparicles spectra (electrons, holes, excitons) in the semiconductor closed and opened nanoheterosystems (spherical quantum dots, cylindrical quantum wires) is performed. The investigations are performed within the effective mass approximation and in the framework of rectangular potentials method. The latter are rather simple and they give a good correlation with the experimental data and are convenient for the study of interaction between quasiparticles and phonons in nanoheterosystems where other more detailed models have some mathematical problems.

In the paper the properties of the electron, hole and exciton spectra in complicated spherical quantum dots and cylindrical quantum wires are analyzed in detail. The physical reasons for the similarities and differences of quasiparticles spectra in closed and opened nanoheterosystems are established.