

УДК 537.311.33

ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ ФОРМЫ КВАНТОВЫХ НИТЕЙ И КВАНТОВЫХ ТОЧЕК НА ИХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР

О. Г. Коробкин, А. П. Силин

Исследовано влияние геометрической формы изолированных квантовых нитей (КН) и квантовых точек (КТ) и взаимного расположения связанных КН и КТ на их энергетический спектр.

Одной из главных задач современной оптоэлектроники является создание светоизлучающих приборов и детекторов с заранее заданными свойствами (частотами излучения и поглощения). Наиболее интересными гетероструктурами для этого являются квантовые нити (КН) [1] и квантовые точки [2, 3] разной геометрической формы. Поэтому весьма актуальным представляется исследование изменения геометрической формы КН и КТ (что связано с технологией их изготовления [4 – 7]). Особое внимание привлекает система связанных КН [8] (пористый Si можно также рассматривать как систему КН) и связанных КТ [9 – 11], которые можно использовать и как фотонные кристаллы [12].

В предыдущей работе [13] рассматривался энергетический спектр узкощелевой КН с круглым поперечным сечением. В настоящей работе мы исследуем более реалистичный случай КН и КТ произвольной формы, рассмотрим влияние формы КН и КТ на их энергетический спектр, а также исследуем взаимодействие КН и КТ. Ограничимся однозонным приближением, которое применимо для достаточно широкозонных гетероструктур (например, для $GaAs/AlGaAs$, $Ge/GeSi$ и $CdSe/ZnSe$). Для узкощелевых полупроводниковых гетероструктур нужно использовать более сложные модели (например, двухзонное дираковское приближение [13 – 15]). Однако используемый нами метод дает качественные оценки и для узкощелевых КН и КТ.

В настоящей работе будет рассмотрена двумерная квантовая яма (КЯ), которая описывается следующим безразмерным уравнением Шредингера:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} + U(x, y) \right] \cdot \Psi_{nm}(x, y) = E_{nm} \Psi_{nm}(x, y), \quad (1)$$

в котором в качестве единиц длины (a_x) и энергии (E_x) используем

$$a_x = \frac{\hbar^2 \epsilon}{me^2}, \quad E_x = \frac{\hbar^2}{2ma_x^2}. \quad (2)$$

Здесь m – эффективная масса, ϵ – диэлектрическая проницаемость, которые мы считаем одинаковыми по всей гетероструктуре; $U(x, y)$ – двумерный потенциал носителей тока в квантовой яме:

$$U(r) = \begin{cases} 0 & \text{внутри КЯ,} \\ U_0 & \text{вне КЯ.} \end{cases} \quad (3)$$

Рассматриваемый нами двумерный случай соответствует КН и КТ, у которых характерные размеры по осям x и y (x_0 и y_0) существенно отличаются от характерного размера по оси z (z_0):

$$z_0 \gg x_0, y_0 \quad (4)$$

или

$$z_0 \ll x_0, y_0. \quad (5)$$

При выполнении неравенства (4) уравнение (1) описывает КН и энергетический спектр E_{nm} соответствует дну энергетических минизон, описывающих свободное движение электронов вдоль оси z (оси КН).

При выполнении неравенства (5) уравнение (1) описывает плоские КТ, у которых разность уровней размерного квантования по оси z $\Delta E_z \sim z_0^{-2}$ существенно превосходит $E_{nm} \sim (x_0^2 + y_0^2)^{-2}$. Поэтому одинаковый энергетический спектр E_{nm} будет у каждого уровня квантования, от которого будем отсчитывать энергию.

Простейшие оценки можно аналитически получить для КЯ с бесконечно высокими стенками ($U_0 = \infty$) и с достаточно простой геометрической формой. У круговых КЯ с радиусом a энергетический спектр имеет следующий вид:

$$E_{nm}^{(1)} = \frac{\pi}{S} j_{nm}^2, \quad n = 1, 2, \dots, \quad |m| = 0, 1, 2, \dots, \quad (6)$$

где $S = \pi a^2$ – площадь КЯ, j_{nm} – n -й корень функции Бесселя m -го порядка. У прямоугольных КЯ со сторонами x_0 и y_0 уровни энергии следующие:

$$E_{nm}^{(2)} = \frac{2\pi^2}{S} \varphi_{nm}(\zeta), \quad n, m = 1, 2, \dots \quad (7)$$

Здесь $S = x_0 y_0$ – площадь КЯ, $\varphi_{nm}(\zeta)$ – параметр формы,

$$\varphi_{nm}(\zeta) = \frac{1}{2} \left(\frac{n^2}{\zeta} + m^2 \zeta \right), \quad \zeta = \frac{x_0}{y_0}. \quad (8)$$

Очевидно, что для прямоугольных КЯ с одинаковым значением S энергии могут существенно отличаться в зависимости от их формы, так, например, второй уровень квадратной КЯ совпадает с основным состоянием КЯ той же площади при $\zeta = 0.21$. Уровни размерного квантования в круговой КЯ ниже, чем в квадратной КЯ с той же площадью, так, $E_{10}^{(2)}/E_{11}^{(1)} = 0.92$.

Расчет энергетического спектра для КЯ с конечной глубиной и более сложной геометрической формой был проведен численно. Квантовая яма помещалась в квадратный потенциальный ящик с бесконечно высокими стенками и стороной $d = 8$, что соответствует окружению рассматриваемой гетероструктуры диэлектриком или вакуумом.

Для исследования зависимости энергии основного состояния E_0 от геометрической формы КЯ был рассмотрен ряд КЯ различной неправильной формы (какие могут образовываться при выращивании КН и КТ), но с одинаковой площадью S (некоторые КЯ и волновые функции основного состояния приведены на рис. 1).

Геометрическую форму этих КЯ мы также характеризуем параметром $\zeta = x_0/y_0$ (8), где x_0 и y_0 определяются как размеры прямоугольной ямы той же площади, имеющей с данной КЯ наибольшее пересечение. Значения $\varepsilon = E_0/U_0$ для КЯ неправильной формы с различными значениями ζ при $S = 8.7$ и $U_0 = 50$ приведены на рис. 2.

На рис. 2 приведены также численные расчеты для КЯ с теми же U_0 , S и ζ прямоугольной (кривая 1) и эллиптической (кривая 2) форм. Для эллиптической КЯ в качестве ζ берется отношение малой и большой осей эллипса. Видно, что существенно лучшую аппроксимацию (особенно для малых ζ) дают эллиптические КЯ. Поэтому для расчета энергетического спектра КН и КТ с произвольным поперечным сечением можно воспользоваться результатами расчета эллиптических КЯ с теми же значениями U_0 , S и ζ .

Для исследования зависимости энергетического спектра связанных КЯ от расстояния между ними рассмотрим две одинаковые квадратные КЯ с глубиной $U_0 = 10$ и со

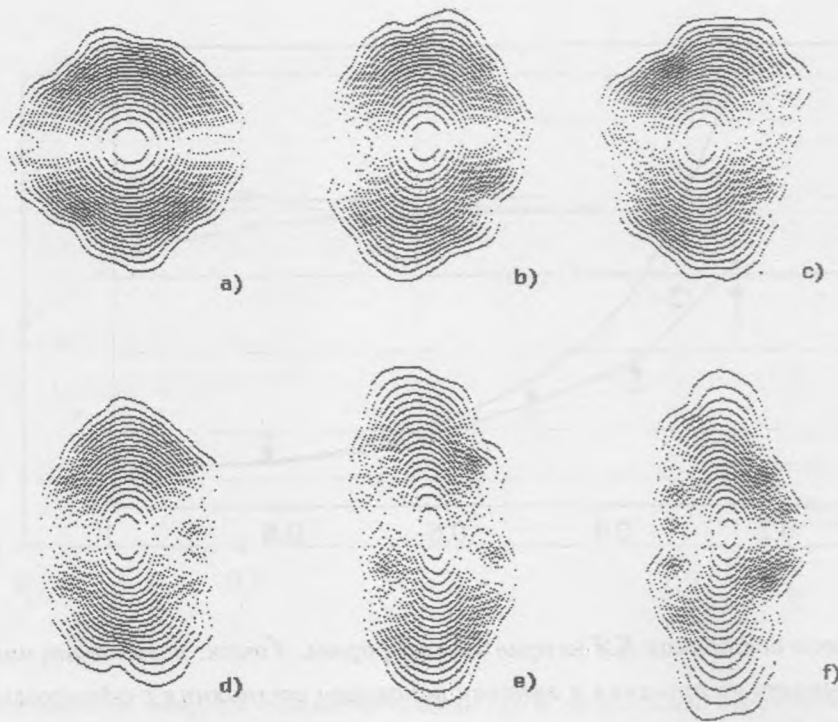


Рис. 1. Примеры КЯ неправильной формы для $S = 8.7$ и $U_0 = 50$, с различными значениями параметра ζ . Параметры КЯ следующие: а) $\zeta = 1$, $\varepsilon = 0.22$; б) $\zeta = 0.81$, $\varepsilon = 0.236$; в) $\zeta = 0.67$, $\varepsilon = 0.249$; д) $\zeta = 0.5$, $\varepsilon = 0.252$; е) $\zeta = 0.37$, $\varepsilon = 0.317$; ф) $\zeta = 0.25$, $\varepsilon = 0.38$. Показаны также волновые функции основного состояния.

стороной квадрата $a = 2$ на расстоянии b друг от друга.

Основное состояние в такой структуре расщепляется на симметричное и антисимметричное состояния, волновые функции которых приведены на рис. 3.

У симметричного состояния вероятность нахождения электрона в области барьера между КЯ нигде не обращается в нуль и существенно превосходит соответствующую вероятность для антисимметричного состояния, поэтому зависимость энергии от расстояния у симметричного состояния существенно сильнее, чем у антисимметричного. Это приводит к заметному расщеплению между этими состояниями при малых расстояниях.

На рис. 4 приведена зависимость энергии симметричного (кривая 1) и антисимметричного (кривая 2) состояний от расстояния между КЯ.

Для полупроводниковых КН и КТ (например, на основе $GaAs$) это расщепление

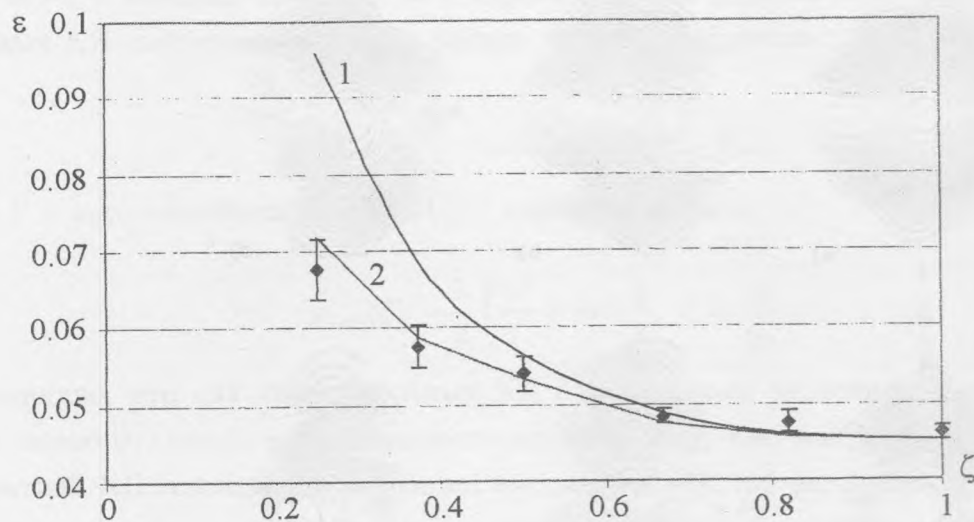


Рис. 2. Энергии основного состояния КЯ неправильной формы. Точки: результат численного расчета. Разброс указывает на отличия в энергии основного состояния с одинаковыми ζ , но разной геометрической формой. 1 – аппроксимация прямоугольной КЯ; 2 – аппроксимация эллиптической КЯ.

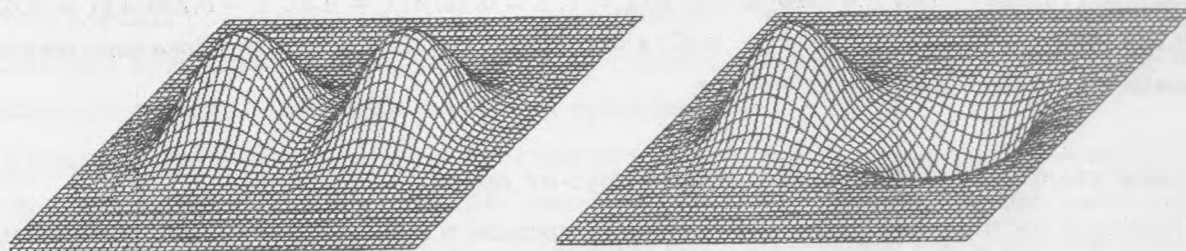


Рис. 3. Волновые функции симметричного (а) и антисимметричного (б) состояний.

можно наблюдать уже при азотных температурах.

Таким образом, нам удалось показать, во-первых, что для расчета энергетического спектра КЯ неправильной формы можно использовать приближение формы эллипса. Во-вторых, оказалось, что при близком расположении нескольких КЯ их основное состояние расщепляется, причем уже для случая двух КЯ расщепление может достигать 40%.

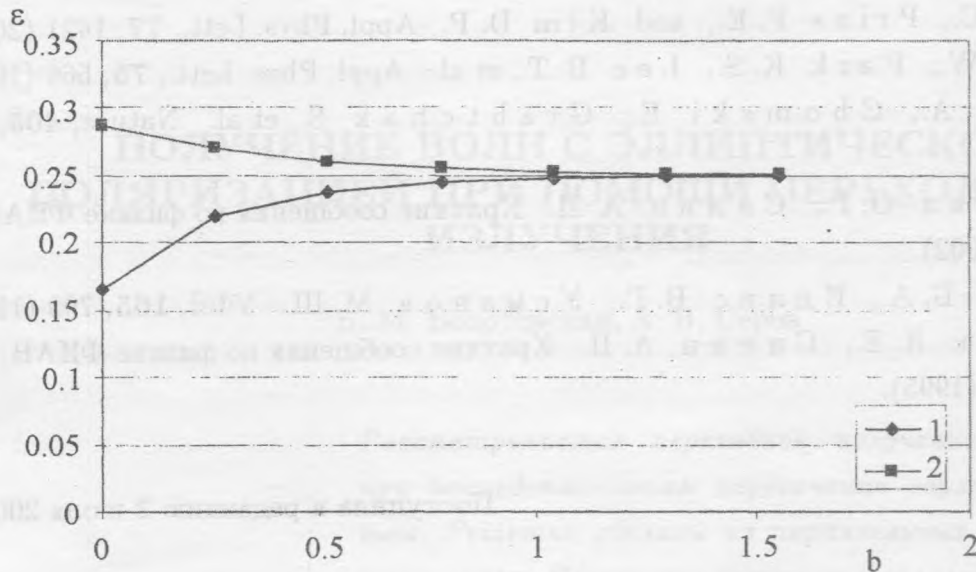


Рис. 4. Зависимость энергий симметричного (1) и антисимметричного (2) состояний от расстояния между КЯ. Расстоянию $r = 0$ соответствует прямоугольная яма 4×2 .

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Tans S. J., Verschueren A. R. M., and Dekker C. Nature, **393**, 49 (1998).
- [2] Warburton V. M., Schläflin C., Haft D., et al. Nature, **405**, 926 (2001).
- [3] Устинов В. М., Жуков А. Е., Ковш А. Р. и др. Изв. РАН, сер. физ., **65**, 214 (2001).
- [4] Денисов Д. В., Устинов В. М., Цыркин Г. Э., Егоров В. А. Изв. РАН, сер. физ., **65**, 211 (2003).
- [5] Rabe M., Lowosh M., Henneberger F. J. Cryst. Growth, **184/185**, 248 (1998).
- [6] Novikov A. V., Andreev V. A., Vostokov N. V., et al. Matter. Sci. Eng., **B89**, 62 (2002).
- [7] Востоков Н. В., Дроздов Ю. Н., Красильник З. О. и др. Изв. РАН, сер. физ., **67**, 159 (2003).
- [8] Sanham L. T. Appl. Phys. Lett., **77**, 4 (2000).

- [9] Thieb W. Surf. Sci. Rep., **29**, 91 (1997).
- [10] Single C., Prins F. E., and Kim D. P. Appl. Phys. Lett., **77**, 1421 (2001).
- [11] Park J. W., Park K. S., Lee B. T., et al. Appl. Phys. Lett., **75**, 566 (1999).
- [12] Blanco A., Chomski E., Grabtchak S., et al. Nature, **405**, 437 (2000).
- [13] Коробкин О. Г., Силин А. П. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 10, 38 (2002).
- [14] Волков Б. А., Идлис В. Г., Усманов М. Ш. УФН, **165**, 799 (1995).
- [15] Печеник Л. Е., Силин А. П. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 9-10, 63 (1995).

Поступила в редакцию 2 июля 2003 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. ...
2. ...
3. ...
4. ...
5. ...
6. ...
7. ...
8. ...
9. ...
10. ...
11. ...
12. ...
13. ...
14. ...
15. ...
16. ...
17. ...
18. ...
19. ...
20. ...
21. ...
22. ...
23. ...
24. ...
25. ...
26. ...
27. ...
28. ...
29. ...
30. ...
31. ...
32. ...
33. ...
34. ...
35. ...
36. ...
37. ...
38. ...
39. ...
40. ...
41. ...
42. ...
43. ...
44. ...
45. ...
46. ...
47. ...
48. ...
49. ...
50. ...
51. ...
52. ...
53. ...
54. ...
55. ...
56. ...
57. ...
58. ...
59. ...
60. ...
61. ...
62. ...
63. ...
64. ...
65. ...
66. ...
67. ...
68. ...
69. ...
70. ...
71. ...
72. ...
73. ...
74. ...
75. ...
76. ...
77. ...
78. ...
79. ...
80. ...
81. ...
82. ...
83. ...
84. ...
85. ...
86. ...
87. ...
88. ...
89. ...
90. ...
91. ...
92. ...
93. ...
94. ...
95. ...
96. ...
97. ...
98. ...
99. ...
100. ...