

УДК 538.9;537.874

ОБ ЭФФЕКТЕ ПЕРЕСЕЧЕНИЯ ПОДЗОН РАЗМЕРНОГО КВАНТОВАНИЯ В ТОНКИХ КВАНТОВЫХ НИТЯХ

А. М. Мандель¹, В. Б. Ошурко^{1,2}, С. М. Першин², С. Г. Веселко¹,
Е. Е. Карпова¹, А. А. Шарц¹, П. В. Аристархов¹

Впервые, насколько нам известно, (k, p) -теория Кейна, описывающая перенормировку массы электрона в объемных полупроводниках, модифицирована для тонких (толщиной несколько нм) квантовых нитей. Показано, что продольная эффективная масса электрона возрастает с ростом квантовых чисел поперечного движения. Это приводит к уникальным особенностям спектра электронов в нити при соблюдении двух условий: 1) зонная структура материала нити имеет ковариантный тип, что делает невозможной локализацию дырок и 2) радиус нити должен быть достаточно мал. В результате дисперсионные кривые локализованных на нити электронов пересекаются, а связанные с ними энергетические подзоны перекрываются. Поэтому продольный электрический импульс легко создаёт инверсию заселённости. Это может служить теоретической основой для нового принципа работы квантовых усилителей и генераторов.

Ключевые слова: тонкая квантовая нить, модификация (k, p) -теории Кейна, поперечная и продольная масса электрона, перекрытие подзон размерного квантования, инверсия заселённости.

Полупроводниковые 1D-гетероструктуры – квантовые нити – пока значительно уступают гетероструктурам других размерностей (квантовым точкам и квантовым ямам) как в развитии теории, так и в практическом применении. Между тем, именно их геометрия ярче всего проявляет наиболее интересные и во многом до сих пор загадочные

¹ МГТУ «СТАНКИН», 127994 Россия, Москва, Вадковский пер., 1.

² ИОФ РАН, 119991 Россия, Москва, ул. Вавилова, 38; e-mail: arkadimandel@mail.ru.

эффекты квантовой механики. Это различные опыты по схеме Юнга, проявления квантовой телепортации, парадокс Ааронова–Бома и т.д. Все подобные явления объединяет геометрия протяженных и замыкающихся траекторий интерферирующих частиц, фазами которых можно, так или иначе, управлять внешними полями.

В данной работе кратко описано решение задачи о формировании эффективных масс и спектра электронов в тонкой квантовой нити. Здесь выбран ковариантный тип гетероструктуры (отметим, достаточно редко встречающийся), чтобы не усложнять этот “чисто электронный” спектр дырочными взаимодействиями и экситонными уровнями. Как обычно, широкозонный полупроводник служит матрицей, а узкозонный материал нити создает 1D потенциальную яму для электронов и 1D потенциальный барьер для дырок. Примером может служить гетеросистема InAs/AlSb [1], для которой и проведены все конкретные расчеты. Картина зонной структуры этой гетеросистемы подробно описана и иллюстрирована в [2]. Ввиду малых поперечных размеров нити характеристики поперечных электронных уровней значительно отличаются от объемного полупроводника.

Подобная ситуация типична для задач размерного квантования [3, 4]. Однако новым элементом нашего решения является *самосогласованный подход* к данной задаче. Дело в том, что эффективные характеристики электронов, локализованных в окрестности нити, зависят от зонной структуры поперечных уровней, во многом “недостроенной” и разреженной по сравнению с объемным полупроводником. Они зависят от размеров нити, формы ее поперечного сечения, напряжений на гетерогранице и еще ряда факторов. В то же время сама эта поперечная зонная структура определяется характеристиками электронов и, прежде всего, их эффективной массой. Таким образом, расчет поперечных волновых функций и поперечных уровней энергии электрона в тонкой квантовой нити может быть выполнен *только совместно* с расчетом его эффективной массы в материале нити.

Механизм перенормировки эффективной массы электрона в объемных полупроводниках состава $A^{III}B^V$ описывает известная (k, p) -теория Кейна [5–7]. Основная идея этого механизма состоит в том, что масса обычного “атомного” электрона уменьшается за счет перемешивания S -состояния на дне зоны проводимости с дырочными P -состояниями на потолке валентной зоны. Наиболее существенно на эффективную массу электрона влияет ширина запрещенной зоны [7]. Мы трансформировали эту теорию для условий размерного квантования в работах [2, 8, 9] в 0D-геометрии квантовых точек. Суть такой трансформации составляют два момента. Во-первых, в условиях размер-

ного квантования гетероструктур перенормируется не масса свободного электрона, а эффективная масса электрона широкозонной матрицы M^* . Во-вторых, роль запрещенной зоны в материале нити играет щель между потолком валентной зоны в нити и основным состоянием локализованного электрона E_{00} . Естественно, каждый уровень поперечного движения задается двумя квантовыми числами, связанными с радиальным и азимутальным движением. Первым возбужденным уровнем поперечного движения будет E_{01} , следующим – E_{10} и т. д. В пределе “толстой нити” зонная структура поперечных уровней перейдет в структуру объемного проводника, и основное состояние электрона в нити “сядет” на дно зоны проводимости. В результате для поперечной массы электрона $m_{tr}^*(R)$ получается следующее выражение²

$$\mu(R) = \frac{m_{tr}^*(R)}{M^*} = \frac{[\varepsilon_{g1} + \Delta E_c(1 - \varepsilon_{00})][\varepsilon_{g1} + \Delta + \Delta E_c(1 - \varepsilon_{00})]}{B(1 - \varepsilon_{00})(1 - A\varepsilon_{00}) + \frac{M^*}{m^*}D\varepsilon_{00}[1 + A(1 - A\varepsilon_{00})]}, \quad (1)$$

где ΔE_c – разность энергий дна зоны проводимости в матрице (материале барьера) и нити, Δ – энергия спин-орбитального расщепления дырок, ε_{g1} – ширина запрещенной зоны материала нити, $\varepsilon_{00} = E_{00}/\Delta E_c$,

$$A = \Delta E_c(3\varepsilon_{g1} + 2\Delta)[\varepsilon_{g1}(3\varepsilon_{g1} + 3\Delta E_c + 4\Delta) + 2\Delta(\Delta + \Delta E_c)]^{-1} = \text{const},$$

$$B = (\varepsilon_{g1} + \Delta E_c)(\varepsilon_{g1} + \Delta + \Delta E_c) = \text{const},$$

$$D = \varepsilon_{g1}(\varepsilon_{g1} + \Delta) = \text{const}.$$

Энергия основного состояния E_{00} в зависимости от радиуса нити R находится из решений соответствующих уравнений Шредингера внутри нити и вне ее и сшивания логарифмической производной волновой функции на гетерогранице. Соответствующее уравнение имеет вид

$$\frac{J_1[\sqrt{\mu(R)(1 - \varepsilon_{00})}R]}{J_0[\sqrt{\mu(R)(1 - \varepsilon_{00})}R]} = \sqrt{\frac{\varepsilon_{00}}{\mu(R)(1 - \varepsilon_{00})}} \frac{K_1(\sqrt{\varepsilon_{00}}R)}{K_0(\sqrt{\varepsilon_{00}}R)}, \quad (2)$$

где J_0, J_1, K_0, K_1 – функции Бесселя и Макдональда соответствующих порядков.

Решая совместно (1) и (2), можно определить поведение поперечной массы электрона в нити в зависимости от энергии основного состояния (рис. 1). Энергия следующих уровней находится аналогично.

² Эффекты “собственной” анизотропии эффективной массы, связанные с различием главных значений тензоров эффективных масс в объемных полупроводниках, мы здесь не рассматриваем. Ясно, что это лишь добавит громоздкости и замаскирует суть изучаемого явления.

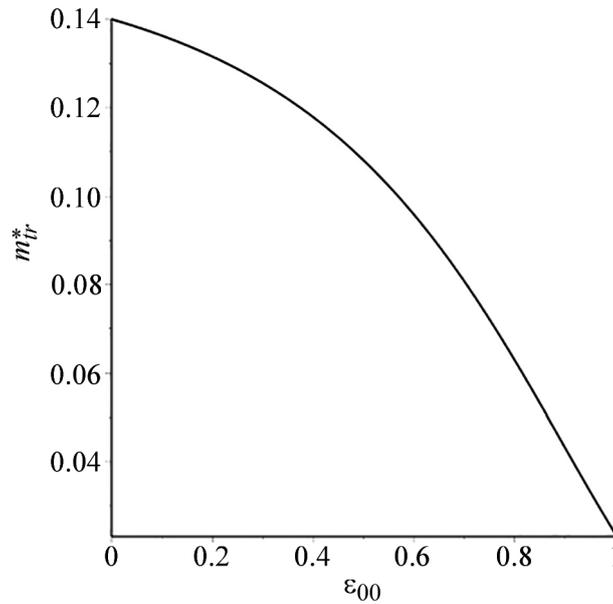


Рис. 1: Зависимость поперечной эффективной массы электрона в нити (в единицах массы свободного электрона m_e) от энергии основного состояния (в единицах глубины ямы) для гетероструктуры $InAs/AlSb$. Эта масса с уменьшением толщины нити меняется от значения, характерного для материала барьера $AlSb$ ($m_{tr}^*(0) = M^* = 0.14m_e$) до значения, характерного для материала нити ($m_{tr}^*(1) = m^* = 0.026m_e$) [1].

Отметим, что вопрос о массе электрона “как целого” при квантованном поперечном движении не возникает. Напротив, для квазиклассического продольного движения это важно. Как известно [3, 4], спектр электрона в квантовой нити стандартно описывается выражением

$$E = E_{nq} + p_z^2/2m_l^*(R), \quad (3)$$

причем p_z – продольный импульс электрона, n и q – квантовые числа поперечного движения, а $m_l^*(R)$ – продольная эффективная масса электрона в нити. Если нить тонкая, на каждом поперечном уровне E_{nq} возникает своя подзона размерного квантования. При этом продольная масса электрона, связанная с его квазиклассическим движением вдоль нити, характеризует электрон именно как цельный локализованный объект.

Главный результат данной работы обусловлен тем, как именно продольная масса электрона зависит от поперечных квантовых чисел n и q . Ясно, что ее эффективное значение определяется тем, сколько времени электрон при продольном движении проводит внутри нити, и сколько – в материале барьера. Это задают *поперечные* волновые функции электрона, входящие в уравнение типа (2). Обычное квантовое усреднение

дает

$$m_{l(nq)}^*(R) = N^{-1} [m_{tr}^*(R) \int_0^R d\rho \cdot \rho \psi_{nq}^2(\rho) + M^* \int_R^\infty d\rho \cdot \rho \psi_{nq}^2(\rho)], \quad (4)$$

где N – постоянная нормировки, а волновые функции электрона внутри нити и вне ее

$$\psi_{nq}(\rho) \sim \begin{cases} J_q[\sqrt{\mu(R)(1 - \varepsilon_{nq})}\rho] & r < R \\ BK_q(\sqrt{\varepsilon_{nq}}\rho) & r > R. \end{cases}$$

Физически ясно, что электрон все больше вытесняется из нити с ростом поперечных квантовых чисел. Поэтому его продольная эффективная масса согласно (4) растет с ростом n и q , ибо электрон все больше времени проводит в широкозонном материале барьера. Это, во-первых, приводит к увеличению длины пробега и длины когерентности электрона внутри нити. Во-вторых, с дисперсионными кривыми возникает ситуация, показанная на рис. 2.

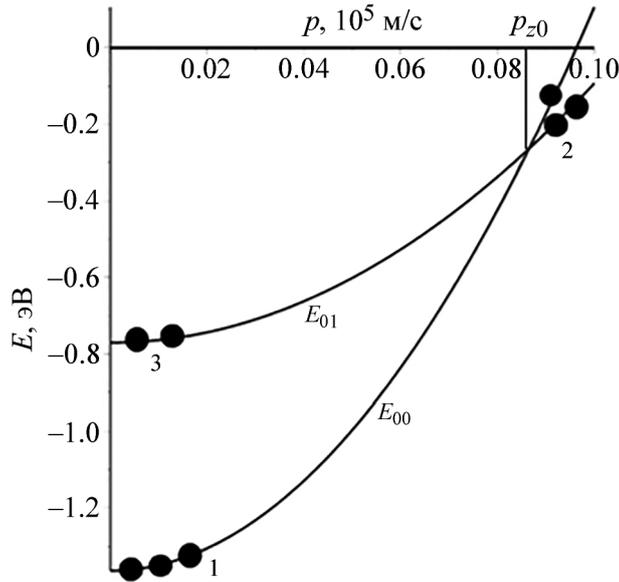


Рис. 2: Дисперсионные кривые для электрона в основном и первом возбужденном состоянии в квантовой нити $InAs/AlSb$, рассчитанные согласно (1)–(4). Схематически показано образование инверсии заселенности с помощью электрического импульса.

Например, при критическом значении продольного импульса, определяемого из уравнения

$$E_{00} + p_{z0}^2/2m_{l(00)}^*(R) = E_{01} + p_{z0}^2/2m_{l(01)}^*(R), \quad (5)$$

два низших уровня меняются местами, поскольку $m_{l(00)}^*$ существенно меньше $m_{l(01)}^*$. При $p_z > p_{z0}$ электрону энергетически выгодно перейти с уровня E_{00} на уровень E_{01} . Поскольку разность орбитальных моментов этих состояний составляет $\Delta L_z = \hbar$, такой переход разрешен и будет, скорее всего, безызлучательным. Таким образом, создать инверсию заселенности в тонкой квантовой нити можно с помощью продольного электрического импульса. Схематически последовательность этого процесса показана на рис. 2.

В состоянии равновесия электронам энергетически выгодно практически полностью заселить основное состояние, т. к. плотность состояний в квантовой нити имеет корневую особенность в окрестности дискретного уровня $g(E) \sim 1/\sqrt{E - E_{00}}$ [3].

Ясно, что комнатные температуры ситуацию сильно не изменят³. Продольный импульс электрического поля разгоняет электроны вдоль нити, и при превышении критического импульса p_{z0} (5) начнутся переходы на первый возбужденный уровень, что демонстрирует на рис. 2 конфигурация 2. Разумеется, параметры импульса должны обеспечить достаточное ускорение электронов в пределах длины нити. Высокая подвижность электрона в нити этому способствует. У торца нити электроны будут естественным образом образовывать конфигурацию 3 с инверсной заселенностью уровней.

В заключение отметим два важных обстоятельства. Во-первых, ввиду ориентации орбитального момента электрона вдоль оси нити излучение фотона (как спонтанное, так и вынужденное) при описываемых переходах наиболее вероятно в этом же направлении. Во-вторых, чтобы приведенный выше механизм работал, необходимо выполнение двух условий: зонная структура должна иметь ковариантный тип (для исключения локализации дырок), а нить должна быть достаточно тонкой (чтобы размерное квантование существенно изменяло эффективные массы электронов в соседних подзонах).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-07-00983 А) и Министерства высшего образования и науки РФ (грант N FSFS-2020-0025).

³ Ее может несколько скорректировать кулоновское взаимодействие локализованных электронов, ибо дырки на нити локализоваться не могут, так что избыточный отрицательный заряд нити не компенсируется. Для системы квантовых точек это приводит к ограничению на вероятность заполнения вакантных уровней [9].

Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan, *Journal of Applied Physics* **89**(11), 5815 (2001). DOI: 10.1063/1.1368156 .
- [2] А. М. Мандель, В. Б. Ошурко, С. Г. Веселко и др., *Инженерная физика* № 9, 3 (2018). DOI: 10.25791/infizik.09.2018.172 .
- [3] А. Я. Шик, Л. Г. Бакуева, С.Ф. Мусихин, С. А. Рыков, *Физика низкоразмерных систем* (СПб, Наука, 2001), 163с.
- [4] В. Я. Демиховский, Г. А. Вугальтер, *Физика квантовых низкоразмерных структур* (М., Логос, 2000), 246с.
- [5] E. O. Kane, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **1**, 249 (1957).
- [6] L. M. Roth, V. Lax, and S. Zwerling, *Physical Review* **114**(1), 90 (1959).
- [7] А. И. Ансельм, *Введение в теорию полупроводников* (М., Наука, 1987), 616с.
- [8] А. М. Мандель, В. Б. Ошурко, С. Г. Веселко и др., *Краткие сообщения по физике ФИАН* **45**(9), 39 (2018). DOI:10.3103/S1068335618090063.
- [9] А. М. Мандель, В. Б. Ошурко, С. М. Першин, *Квантовая электроника* **49**(5), 505 (2019).

Поступила в редакцию 23 апреля 2020 г.

После доработки 12 августа 2020 г.

Принята к публикации 13 августа 2020 г.