УДК 537.311.33

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР УЗКОЩЕЛЕВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ НИТЕЙ

О. Г. Коробкин, А. П. Силин

В двухзонном (дираковском) приближении эффективной массы рассчитана зависимость энергетических уровней квантовой нити от ее радиуса и высоты потенциального барьера.

В последнее время значительно вырос интерес к исследованию оптических и транспортных свойств низкоразмерных полупроводниковых гетероструктур. В частности, одномерные структуры – квантовые нити (КН) представляют интерес как с точки зрения фундаментальной науки (возможно образование сильно коррелированного электронного состояния – латтинджеровской жидкости [1, 2], наблюдение эффекта Кондо [3] и осцилляций Ааронова–Бома [4]), так и в связи с применением в новых поколениях приборов микро- и оптоэлектроники (например, создание одномерного полевого транзистора на полупроводниковых нанотрубках [5] и нанометровых переключателей [6]).

КН представляет собой квазиодномерную систему, в которой движение носителей тока заквантовано по всем направлениям, кроме одного. Последние достижения полупроводниковой технологии позволяют выращивать КН различных размеров (обычно диаметром $\sim 10 - 100\,\mathring{A}$) из различных полупроводников (в том числе и узкощелевых).

В настоящей работе для исследования энергетического спектра узкощелевых квантовых нитей мы используем двухзонное приближение, которое хорошо описывает полупроводниковые соединения типа A^4B^6 и качественно может использоваться для соединений типа A^3B^5. В рамках такого подхода квантовую нить можно описать с помощью гамильтониана дираковского типа, в котором роль скорости света играет матричный элемент скорости для межзонных переходов [7]:

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}) = (v\gamma^0\vec{\gamma}\cdot\vec{p} + \gamma^0\Delta(\vec{r}) + V(\vec{r}))\cdot\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}), \tag{1}$$

где γ^μ – матрицы Дирака; $\vec{p} = -i\nabla$ – оператор импульса (для простоты мы положили $\hbar = 1$); $2\Delta(\vec{r})$ – ширина запрещенной зоны и $V(\vec{r})$ – работа выхода, которые могут изменяться в пространстве; v – кейновский матричный элемент скорости; $\vec{\gamma} = \{\gamma^1, \gamma^2, \gamma^3\}$.

Рассмотрим упрощенную симметричную модель квантовой нити в виде бесконечного цилиндра радиусом r_0 из одного полупроводника с параметрами $v_0, \Delta_0, V_0 = 0$, заключенного в другом полупроводнике с параметрами v, Δ, V, причем $\Delta_0 < \Delta$.

Подобная система для КН в случае инвертированных зон рассматривалась в работе [8] и для узкощелевых полупроводниковых квантовых точек в работе [9]. В рассматриваемом случае в цилиндрических координатах (r, φ, z) уравнение Дирака имеет следующий вид [7, 8]:

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{r}} \exp(i\gamma^0\gamma^3\varphi/2) \cdot \Phi(r) \cdot e^{i(p_z z + M\varphi)}, \tag{2}$$

$$\left[\gamma^0\gamma^1 v\hat{p}_r + \gamma^0\gamma^2 v\frac{M}{r} + \gamma^0\gamma^3 v p_z + \gamma^0\Delta(r) + V(r)\right] \cdot \Phi(r) = E\Phi(r). \tag{3}$$

Здесь $M = \pm 1/2, \pm 3/2, ...$, $\hat{p}_r = -i\partial_r$ – оператор импульса по r, p_z – импульс свободного движения по оси КН (z). Выбирая следующий вид матриц Дирака:

$$\gamma^0\gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \gamma^0\gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \gamma^0\gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{4}$$

и представляя биспинор Φ в виде $\Phi = \binom{\varphi}{\chi}$, получим систему уравнений, которая после квадрирования дает уравнения Бесселя на компоненты φ $\left(\varphi = \sqrt{r} \cdot \binom{u}{w}\right)$ для определения энергетического спектра КН:

$$\left\{ \begin{aligned} & u'' + \tfrac{1}{r}u' + \left(\tfrac{(E-V)^2 - p_z^2 v^2 - \Delta^2}{v^2} - \tfrac{M^2 - M + \frac{1}{4}}{r^2}\right) \cdot u = 0, \\ & w'' + \tfrac{1}{r}w' + \left(\tfrac{(E-V)^2 - p_z^2 v^2 - \Delta^2}{v^2} - \tfrac{M^2 + M + \frac{1}{4}}{r^2}\right) \cdot w = 0. \end{aligned} \right. \tag{5}$$

Решение этих уравнений внутри ($r < r_0$) и вне ($r > r_0$) КН имеет следующий вид:

$$\text{при } r < r_0: \; N_0\sqrt{r}\begin{pmatrix} J_\ell(rq_0) \\ \alpha_0 J_{\ell'}(rq_0) \end{pmatrix}; \; q_0 = \frac{\sqrt{E^2 - p_z^2 v_0^2 - \Delta_0^2}}{v_0}; \tag{6.1}$$

$$\text{при } r > r_0: \; N\sqrt{r}\begin{pmatrix} K_\ell(rq) \\ \alpha K_{\ell'}(rq) \end{pmatrix}; \; q = \frac{\sqrt{-(E-V)^2 + p_z^2 v^2 + \Delta^2}}{v}. \tag{6.2}$$

Здесь $\ell = M - \frac{1}{2}$, $\ell' = M + \frac{1}{2}$, а через α, α_0, N и N_0 обозначены неизвестные константы, которые надлежащим выбором фазового множителя всегда могут быть сделаны вещественными. Они определяются из нормировки и условий сшивания волновых функций на границе КН при $r = r_0$. Сшивание [10] конечных решений приводит к трансцендентному уравнению, определяющему зависимость энергии КН от параметров квантовой нити, а также M и p_z.

$$\frac{v}{v_0}\sqrt{\frac{E^2-p_z^2v_0^2-\Delta_0^2}{-(E-V)^2+p_z^2v^2+\Delta^2}}\cdot\left(\frac{J_{\ell'}(r_0\sqrt{E^2-p_z^2v_0^2-\Delta_0^2}/v_0)}{J_\ell(r_0\sqrt{E^2-p_z^2v_0^2-\Delta_0^2}/v_0)}-\frac{J_\ell(r_0\sqrt{E^2-p_z^2v_0^2-\Delta_0^2}/v_0)}{J_{\ell'}(r_0\sqrt{E^2-p_z^2v_0^2-\Delta_0^2}/v_0)}\right)=$$

$$=\frac{K_{\ell'}(r_0\sqrt{-(E-V)^2+p_z^2v^2+\Delta^2}/v)}{K_\ell(r_0\sqrt{-(E-V)^2+p_z^2v^2+\Delta^2}/v)}+\frac{K_\ell(r_0\sqrt{-(E-V)^2+p_z^2v^2+\Delta^2}/v)}{K_{\ell'}(r_0\sqrt{-(E-V)^2+p_z^2v^2+\Delta^2}/v)}. \tag{7}$$

В дальнейшем мы ограничимся симметричным случаем $v = v_0$, $V = 0$ и будем для определенности рассматривать только положительные значения E, соответствующие электронным состояниям (дырочные состояния получаются при смене знака E). Перейдем от симметричной "релятивистской" энергии E к "полупроводниковой" ϵ, отсчитываемой от дна зоны проводимости ($E = \Delta_0 + \epsilon$), введем глубину потенциальной ямы $U = \Delta - \Delta_0$, эффективную массу $\mu = \Delta_0/v^2$ и безразмерный параметр, характеризующий взаимодействие валентной зоны и зоны проводимости $\alpha = \Delta_0/U$ (в однозонном приближении $\alpha = \infty$) и перейдем к безразмерным величинам:

$$\epsilon_0 = \epsilon/U,\ \rho = \frac{r_0}{\hbar}\sqrt{2\mu U},\ p_0 = p_z v/U. \tag{8}$$

Тогда энергия электрона в квантовой нити

$$\epsilon_0^{nM}(p_0) = \sqrt{p_0^2+\alpha^2+2\alpha\zeta_{nM}}-\alpha \tag{9}$$

будет определяться безразмерным энергетическим параметром ζ_{nM}, который является n-корнем трансцендентного уравнения

$$\sqrt{\frac{\zeta}{1+2/\alpha-\zeta}}\cdot\left(\frac{J_{\ell'}(\rho\sqrt{\zeta})}{J_\ell(\rho\sqrt{\zeta})}-\frac{J_\ell(\rho\sqrt{\zeta})}{J_{\ell'}(\rho\sqrt{\zeta})}\right)=\frac{K_{\ell'}(\rho\sqrt{1+2/\alpha+\zeta})}{K_\ell(\rho\sqrt{1+2/\alpha+\zeta})}+\frac{K_\ell(\rho\sqrt{1+2/\alpha+\zeta})}{K_{\ell'}(\rho\sqrt{1+2/\alpha+\zeta})}. \tag{10}$$

Настоящая работа выполнена при частичной поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант 00–025–17529).

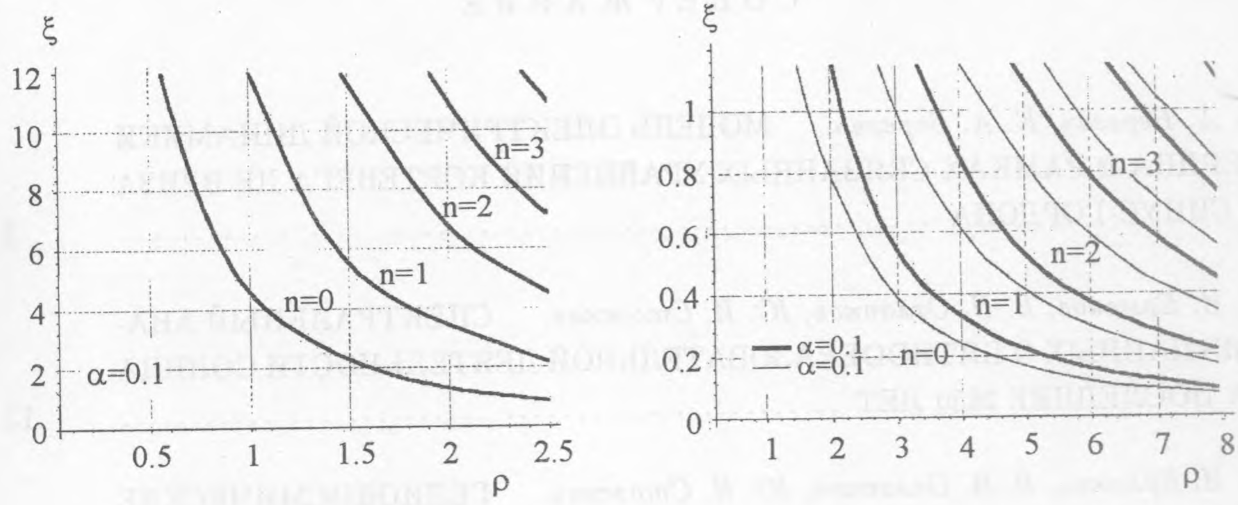

Рис. 1. *Зависимость параметра энергии ζ_{nM} от безразмерного радиуса для случая $M = 1/2$ и различных значений $\alpha(\alpha = 1,\ \alpha = 10$ и $\alpha = 0.1)$.*

ЛИТЕРАТУРА

[1] Voit J. Rep. Progr. Theor. Phys., **58**, 977 (1995).

[2] Сабаинов В. А. Изв. РАН, сер. физ., **66**, 220 (2002).

[3] Nygard J., Cobden D. H., and Lindelof P. E. Nature, **408**, 342 (2000).

[4] Ведерников А. И., Говоров А. О., Чаплик А. В. Изв. РАН, сер. физ., **66**, 212 (2002).

[5] Tans S. J., Verschneren A. R. M., and Dekker C. Nature, **393**, 49 (1998).

[6] Gittens D. I., Bethell D., Schiffrin D. J., and Nickols R. J. Naturte, **408**, 45 (2000).

[7] Волков В. А., Идлис В. Г., Усманов М. Ш. УФН, **165**, 799 (1995).

[8] Идлис Б. Г., Усманов М. Н. ФТТ, **28**, 767 (1994).

[9] Нуцалов Ш. У., Силин А. П. Краткие сообщения по физике ФИАН N 3, 11 (2001).

[10] Силин А. П., Шубенков С. В. ФТТ, **40**, 1345 (1998).

Поступила в редакцию 3 декабря 2002 г.