

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА ОТКРЫТОЙ СФЕРИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ С ДЕЛЬТА-ПОТЕНЦИАЛОМ

© 2011 Н. В. Королев, С. Е. Стародубцев, Е. Н. Бормонтов, А. Ф. Клиньских

Воронежский государственный университет, Университетская пл. 1, 394006 Воронеж, Россия

Поступила в редакцию: 03.11.2010 г.

Аннотация. Представлена модель, позволяющая решить задачу о нахождении спектра и волновых функций электрона в открытой сферической квантовой точке. Полученные результаты согласуются с данными модели квантовой точки, граница которой аппроксимируется прямоугольным потенциальным барьером. Показано, что эффективная масса и проницаемость дельта-потенциала могут служить управляющими параметрами для оптимизации энергетической структуры открытой сферической квантовой точки с целью получения реальных структур с заданными физико-химическими свойствами.

Ключевые слова: сферическая квантовая точка, дельта-потенциал, уравнение Шредингера.

ВВЕДЕНИЕ

За последние годы разработано несколько моделей для описания основных характеристик сферических квантовых точек (СКТ). Первым шагом к теоретическому рассмотрению экспериментально полученных СКТ стало описание закрытых квантовых точек (КТ) в так называемой модели «жестких стенок» [1—3]. Исходя из технологической возможности контроля «жесткости» удерживающего потенциала, была разработана модель параболического потенциала, применяемая для расчета спектра как отдельной КТ [3, 4], так и «молекулы» из КТ [5].

Однако для описания реальных систем [6, 7] наиболее адекватна модель открытой СКТ, в которой имеется отличная от нуля вероятность ухода частицы во внешнюю среду, при этом уровни дискретного спектра системы приобретают ширину. Отметим, что при описании открытых систем важно корректное задание граничных условий. Наиболее распространенным подходом является аппроксимация границы прямоугольным потенциальным барьером, что достаточно хорошо описывает многослойные структуры [7—10], но данный подход является небеспорным при толщинах пленок порядка ~ 1 нм.

Цель предлагаемой работы состоит в построении простой и легко анализируемой модели, описывающей открытую сферическую квантовую точку в приближении эффективной массы, роль границы в которой выполняет дельта-потенциал.

Интерес представляют спектр и волновые функции электрона, а также динамика квазистационарных состояний при различной проницаемости дельта-потенциала, играющего роль потенциального барьера.

ЗАКРЫТАЯ СФЕРИЧЕСКАЯ КВАНТОВАЯ ТОЧКА

Чтобы изучить эволюцию спектра СКТ с дельта-потенциалом, сначала рассмотрим случай закрытой СКТ. Расчет энергетического спектра и волновых функций электрона в закрытой сферической квантовой точке проводим в модели «жестких» стенок. Стационарное уравнение Шредингера в приближении эффективной массы μ имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \Psi + U(r) \Psi = E \Psi.$$

Потенциал внутри квантовой точки зависит только от радиальной компоненты:

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r < r_0, \\ +\infty, & r \geq r_0. \end{cases}$$

С учетом сферической симметрии и изотропности квантовой точки, а также вида потенциала, находим решение уравнения Шредингера по методу разделения переменных:

$$\Psi_{lm}(r, \theta, \phi) = R_l(r) Y_{lm}(\theta, \phi),$$

где $R_l(r)$ — радиальная часть волновой функции, $Y_{lm}(\theta, \phi)$ — сферические гармоники, $l = 0, 1, 2, \dots$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ — орбитальное и магнитное

квантовые числа. Радиальная часть $R_l(r)$ удовлетворяет уравнению на функции Бесселя:

$$\frac{d^2 R_l}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_l}{dr} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_l = 0, \quad (1)$$

где $k^2 = \frac{2\mu_i E}{\hbar^2}$ — квадрат волнового числа. Решение уравнения (1) должно удовлетворять условию конечности волновой функции при $r = 0$ и на границе квантовой точки:

$$R_l(0) = R_l(r_0) = 0. \quad (2)$$

В результате получаем

$$R_l = C_1 J_l(kr),$$

где C_1 — нормировочный коэффициент, определяемый из условия нормировки на дискретный спектр:

$$\int_0^{\infty} |R_l|^2 r^2 dr = 1.$$

Спектр системы находится из решения дисперсионного уравнения, которое следует из граничных условий (2):

$$J_l\left(\frac{r_0}{\hbar} \sqrt{2\mu E}\right) = 0.$$

ОТКРЫТАЯ СФЕРИЧЕСКАЯ КВАНТОВАЯ ТОЧКА С ДЕЛЬТА-ПОТЕНЦИАЛОМ

Исследуем энергетический спектр электрона в открытой СКТ в приближении дельта-потенциала на границе (рис. 1):

$$U(r) = \alpha \delta(r - r_0),$$

где r_0 — радиус квантовой точки, α — коэффициент проницаемости барьера. Гамильтониан такой системы в приближении эффективной массы $\mu(r)$ имеет вид:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla^2 \frac{1}{\mu(r)} + U(r).$$

Для данной задачи положим $\mu(r) \equiv \mu$. В виду сферической симметрии квантовой точки решение уравнения Шредингера можно записать следующим образом:

$$\Psi_{lm}(r, \theta, \phi) = R_l(r) Y_{lm}(\theta, \phi).$$

Общее решение уравнения на радиальную часть волновой функции

$$\frac{d^2 R_l^i}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_l^i}{dr} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_l^i = 0$$

есть суперпозиция сферических функций Бесселя первого и второго рода:

$$R_{kl}^i(r) = C_1^i j_l(kr) + C_2^i \eta_l(kr), \quad i = 1, 2.$$

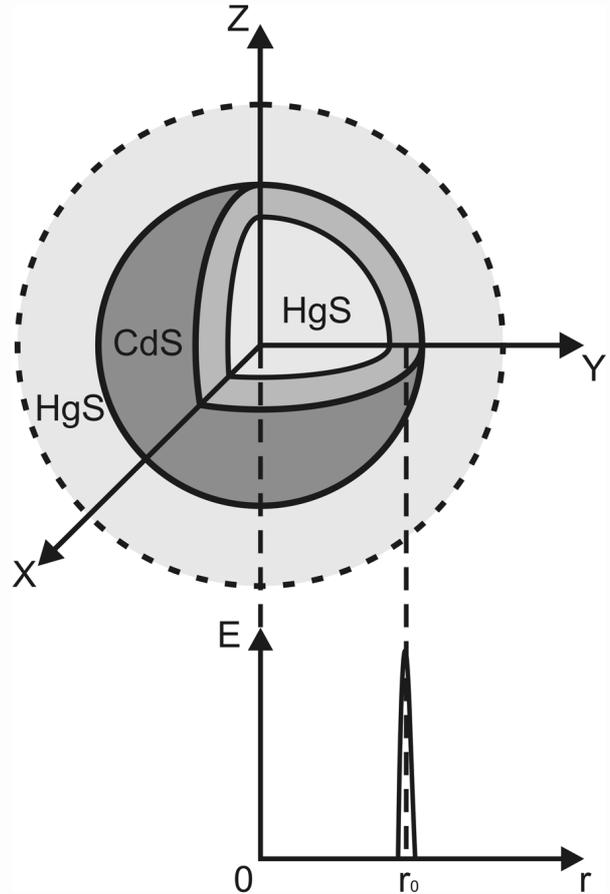


Рис. 1. Геометрическая и энергетическая схема открытой сферической квантовой точки с дельта-потенциалом

С учетом необходимого условия сходимости волновой функции в точке $r = 0$, а также асимптотического поведения функций Бесселя на бесконечности, решение радиального уравнения приобретает вид:

$$R_{kl}(r) = \begin{cases} C_1 j_l(kr), & r < r_0, \\ D_1 h_l^{(1)}(kr), & r \geq r_0. \end{cases}$$

Условия непрерывности волновых функций, скачка потоков вероятностей на границе квантовой точки и условия нормировки:

$$R_{kl}^{(1)}(r_0) = R_{kl}^{(2)}(r_0),$$

$$\frac{dR_{kl}^{(2)}(r_0)}{dr} - \frac{dR_{kl}^{(1)}(r_0)}{dr} = \frac{2\mu}{\hbar^2} \alpha R_{kl}^{(1)}(r_0),$$

$$\int_0^{\infty} R_{kl}(kr) R_{kl}^*(kr) r^2 dr = \delta(k - k'),$$

определяют коэффициенты D_l и C_l :

$$D_l = \frac{k}{\sqrt{2\pi}}, \quad C_l = \frac{k}{\sqrt{2\pi}} \frac{h_l^{(1)}(kr_0)}{j_l(kr_0)},$$

а также дисперсионное уравнение:

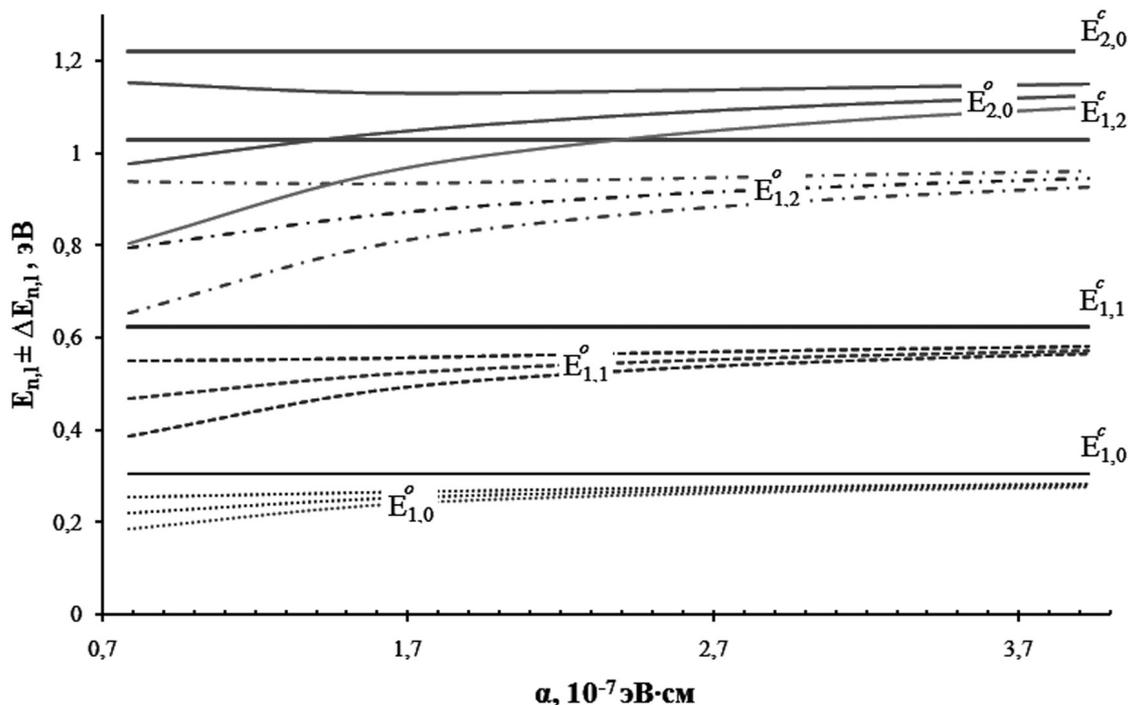


Рис. 2. Квазистационарные состояния E_{nl}^o открытой СКТ при различных значениях коэффициента прозрачности α и спектр E_{nl}^c закрытой СКТ ($r_0 = 10 a_{\text{HgS}}$)

$$\frac{j_{l+1}(kr_0)}{j_l(kr_0)} - \frac{h_{l+1}^{(1)}(kr_0)}{h_l^{(1)}(kr_0)} - \frac{2\alpha\mu}{k\hbar^2} = 0,$$

откуда получаем спектр системы:

$$\tilde{E}_{nl} = E_{nl} - i \frac{\Gamma_{nl}}{2}. \quad (3)$$

Действительная часть E_{nl} определяет энергии квазистационарных состояний, а мнимая — их полуширину $\Gamma_{nl}/2$ [11]. Возможность перехода электрона из связанного состояния в континуум приводит к тому, что возбужденные состояния квантовых систем нельзя рассматривать как строго стационарные [12]. Они обладают конечным временем жизни:

$$\tau_{nl} = \frac{\hbar}{\Gamma_{nl}}. \quad (4)$$

Таким образом, выражения (3) и (4) определяют энергетический спектр и времена жизни электрона в квазистационарных состояниях открытой СКТ.

ЭВОЛЮЦИЯ КВАЗИСТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ ОТКРЫТОЙ СФЕРИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ

Проанализируем эволюцию квазистационарных состояний в рамках изложенной выше модели при различных толщинах слоев в структуре

HgS/CdS/HgS (рис. 1). Вычисления проводились для системы со следующими значениями параметров:

$$m_{\text{HgS}} = 0.036 m_0, m_{\text{CdS}} = 0.2 m_0,$$

$$a_{\text{HgS}} = 5.851 \text{ \AA}, a_{\text{CdS}} = 5.818 \text{ \AA}, V = 1.35 \text{ эВ},$$

где m_0 — масса свободного электрона, V — разрыв зон HgS/CdS [7,13]. Результаты расчетов зависимости $E_{nl} \pm \Delta E_{nl}$ ($\Delta E_{nl} = \Gamma_{nl}/2$) от коэффициента прозрачности α приведены на рис. 2. При изменении геометрических параметров рассматриваемой системы наблюдаются характерные квантово-размерные эффекты, а именно:

- с ростом коэффициента прозрачности α полуширины $\Gamma_{nl}/2$ уменьшаются и в предельном случае ($\alpha \rightarrow \infty$) квазистационарные состояния переходят в энергетические уровни стационарного спектра закрытой СКТ (рис. 2);

- с увеличением радиуса квантовой ямы r_0 квазистационарные состояния сдвигаются в область меньших энергий.

В работах [2, 9, 10] была рассмотрена динамика квазистационарных состояний, рассчитанных для открытой СКТ в рамках формализма S -матрицы, где граница аппроксимировалась прямоугольным потенциальным барьером. На примере аналогичной структуры с приведенными выше параметрами

и $r_0 = 20 a_{\text{HgS}}$, $\Delta = a_{\text{CdS}}$, получены следующие значения энергий (табл. 1) [2].

Сравнение результатов (табл. 1) с нашими данными проводим с учетом выражения для коэффициента проницаемости $\alpha \approx Ud$, где U и d — высота и ширина прямоугольного потенциального барьера соответственно. Отметим, что в работе [2] мнимая часть уравнения (3) определена как $\Gamma'_{nl}/2$. В дальнейшем будем придерживаться этого обозначения. Результаты расчета резонансных уровней и полуширин квазистационарных полос открытой СКТ в модели дельта-потенциала представлены в табл. 2.

Из табл. 1 и 2 видно, что существует определенное различие между найденными значениями энергии уровней. Результаты, полученные в модели дельта-потенциала, завышены, что может быть связано со значениями параметра α и пренебрежением эффективной массой граничного слоя.

Таблица 1. Уровни энергии E_{nl}^c в закрытой СКТ, а также соответствующие им резонансные уровни E_{nl}^o и полуширины квазистационарных полос $\Gamma'_{nl}/2$ открытой СКТ в модели прямоугольного потенциального барьера [2]

$E_n^{c,o} / \Gamma'_n$, мэВ	l		
	0	1	2
E_1^c	53.81	110.73	184.21
E_2^c	224.00	344.94	484.90
E_3^c	526.85	715.74	923.48
E_1^o / Γ'_1	52.55/1.07	109.75/2.42	183.49/4.11
E_2^o / Γ'_2	224.18/4.49	346.74/6.22	488.91/7.95
E_3^o / Γ'_3	531.67/7.72	724.23/9.23	937.39/10.87

Таблица 3. Резонансные уровни E_{nl}^o и полуширины квазистационарных полос $\Gamma'_{nl}/2$ открытой СКТ ($\alpha = 0.323 \cdot 10^{-7}$ эВ·см)

$E_n^{c,o} / \Gamma'_n$, мэВ	l		
	0	1	2
E_1^o / Γ'_1	52.54/5.37	113.67/12.28	194.41/20.96
E_2^o / Γ'_2	240.35/25.31	376.13/37.63	533.91/50.81
E_3^o / Γ'_3	580.34/53.53	792.54/68.82	1027.17/84.60

Изменяя проницаемость дельта-потенциала, приходим к значениям (табл. 3), близким к значениям [2].

Для вычисления поправки к эффективной массе было применено усреднение средневзвешенной величины:

$$\bar{m}_{\text{cp}} = \frac{m_0 r_0 + m_1 r_1}{r_0 + r_1}.$$

В табл. 4 представлены полученные значения энергетического спектра с учетом средневзвешенной эффективной массы, достаточно хорошо согласующиеся со значениями [2].

В заключении отметим, что рассматриваемая модель обеспечивает точное решение задачи о нахождении спектра и волновых функций электрона в открытой сферической квантовой точке. Полученные результаты для спектра зависят от соотношения эффективной массы и проницаемости дельта-потенциала α . Поэтому данные величины

Таблица 2. Уровни энергии E_{nl}^o в закрытой СКТ, а также соответствующие им резонансные уровни E_{nl}^c и полуширины квазистационарных полос $\Gamma'_{nl}/2$ открытой СКТ в модели дельта-потенциала

$E_n^{c,o} / \Gamma'_n$, мэВ	l		
	0	1	2
E_1^c	76.38	156.26	257.08
E_2^c	305.53	461.87	640.18
E_3^c	687.45	920.19	1175.24
E_1^o / Γ'_1	62.66/1.83	129.94/4.60	216.27/8.43
E_2^o / Γ'_2	260.28/11.08	399.192/17.77	559.64/25.33
E_3^o / Γ'_3	604.69/27.52	818.52/37.11	1054.64/47.25

Таблица 4. Резонансные уровни E_{nl}^o и полуширины квазистационарных полос $\Gamma'_{nl}/2$ открытой СКТ ($\bar{m}_{\text{cp}} = 0.044m_0$)

$E_n^{c,o} / \Gamma'_n$, мэВ	l		
	0	1	2
E_1^o / Γ'_1	52.84/1.11	109.09/2.85	180.94/5.31
E_2^o / Γ'_2	216.93/7.10	331.5/11.62	463.57/16.81
E_3^o / Γ'_3	500.23/18.42	675.71/25.20	869.38/32.44

могут служить управляющими параметрами для оптимизации энергетической структуры открытой СКТ с целью получения квантовых точек с заданными физико-химическими свойствами, такими как спектр поглощения (испускания), поляризуемость и отклик на внешние электрические и магнитные поля.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Haus J.W., Zhou H.S., Honma I., Komiyama H.* // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. № 3. P. 1359.
2. *Ткач Н.В., Сети Ю.А.* // ФТП. 2006. Т. 40. Вып. 9. С. 1111.
3. *Greerinxck F., Peeters F.M., Devreese J.T.* // J. Appl. Phys. 1990. V. 68. № 7. P. 3435.
4. *Капуткина Н.Е., Лозовик Ю.Е.* // ФТТ. 1998. Т. 40. № 9. С. 2134.
5. *Капуткина Н.Е., Лозовик Ю.Е.* // ФТТ. 1998. Т. 40. № 11. С. 2127.
6. *Mews A., Kadavanich A.V., Banin U., et al.* // Phys. Rev. B. 1996. V. 53. № 20. P. 13244.
7. *Schooss D., Mews A., Eychmüller A., et al.* // Phys. Rev. B. 1994. V. 49. № 24. P. 17072.
8. *Ткач Н.В., Сети Ю.А.* // ФТТ. 2009. Т. 51. Вып. 5. С. 979.
9. *Ткач Н.В., Сети Ю.А., Зегря Г.Г.* // Письма в ЖТФ. 2007. Т. 33. Вып. 1. С. 70.
10. *Ткач Н.В., Сети Ю.А.* // ФТП. 2009. Т. 43. Вып. 3. С. 357.
11. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Физматгиз, 1974. 752 с.
12. *Давыдов А.С.* Квантовая механика. М.: Наука, 1973. 704 с.
13. *Hethercot A.H.* // Phys. Rev. Lett. 1974. V. 33. № 18. P. 1088.

Королев Никита Викторович — аспирант кафедры физики полупроводников и микроэлектроники Воронежского государственного университета; тел.: (920) 4113957, e-mail: korolevn33@yandex.ru

Стародубцев Сергей Евгеньевич — аспирант кафедры физики полупроводников и микроэлектроники Воронежского государственного университета; тел.: (908) 1435926, e-mail: starodubtcevs@yandex.ru

Бормонтов Евгений Николаевич — д.ф.-мат.н., профессор кафедры физики полупроводников и микроэлектроники Воронежского государственного университета; тел.: (4732) 208633, e-mail: me144@phys.vsu

Клинских Александр Федотович — д.ф.-мат.н., профессор кафедры теоретической физики Воронежского государственного университета, тел. (4732) 208756; e-mail: klinskikh@live.ru

Korolev Nikita V. — the post graduate student, department of physic of semiconductor and microelectronics, Voronezh State University; tel.: (920) 4113957, e-mail: korolevn33@yandex.ru

Bormontov Eugenie N. — grand PhD (physical and mathematical sciences), professor, department of physic of semiconductor and microelectronics, Voronezh State University; tel.: (4732) 208-633, e-mail: me144@phys.vsu

Starodubtcev Sergey E. — the post graduate student, department of physic of semiconductor and microelectronics, Voronezh State University; tel.: (908) 1435926, e-mail: starodubtcevs@yandex.ru

Klinskikh Alexander F. — grand PhD (physical and mathematical sciences), professor, department of theoretical physics, Voronezh State University; tel.: (4732) 208756, e-mail: klinskikh@live.ru