ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
Т. 11, № 1 (2010) С. 39-44

PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLID STATE
V. 11, № 1 (2010) P. 39-44

PACS: 73.21.FG ; 73.90.+F

ISSN 1729-4428

Ю.О. Сеті

Еволюція спектральних параметрів важкої та легкої дірок у трибар'єрній резонансно-тунельній структурі

Чернівецький національний університет ім. Ю.Федьковича
58012 м.Чернівці, вул. Коцюбинського, 2, тел.:(0372)4-48-16, e-mail: ktf@chnu.edu.ua

У моделі ефективних мас та прямокутних потенціальних бар'єрів у симетричній трибар'єрній резонансно-тунельній структурі методом функції розподілу досліджено еволюцію та розщеплення вироджених квазістаціонарних станів важкої та легкої дірки внаслідок зміни потужності зовнішніх бар'єрів.

Показано, що еволюція резонансних енергій і ширин усіх квазістаціонарних станів важкої й легкої дірок якісно однакова. Розщеплення вироджених квазістаціонарних станів обох типів казічастинок відбувається в околі критичних значень товщин зовнішніх бар'єрів, що не перевищують половину товщини внутрішнього.

Ключові слова: резонансно-тунельна структура, квазістаціонарний стан, важка і легка дірки.

Стаття поступила до редакції 16.09.2009; прийнята до друку 15.12.2009.

Вступ

Відкриті резонансно-тунельні системи (РТС), такі як квантові плівки, викликають все більшу зацікавленість дослідників [1-6]. Інтерес до цих наносистем суттєво зріс після того, як у роботах Феіста і Капассо з колегами [7,8] вперше були продемонстровані квантові каскадні лазери, які працювали на дво- та трибар'єрних РТС у терагерцовому діапазоні частот.

Вивчення фізичних явищ у РТС починається з побудови теорії спектрів квазічастинок (електронів та дірок) та їх взаємодії з квантованими і класичними полями. Повної послідовної теорії взаємодії квазічастинок з полями у РТС поки що не існує через принципові математичні труднощі, які виникають уже при спробі застосування методів квантової теорії поля до цих систем. Більше того, ускладнення виникають навіть при розрахунках квазістаціонарних спектрів самих квазічастинок (наприклад, екситонів як взаємодіючих електрона і дірки).

Дослідження резонансних енергій (РЕ) та ширин (РШ) квазістаціонарних станів електрона у квантових точках, дротах та плівках виконувалися в роботах [9-11] методами S-матриці розсіювання, коефіцієнта прозорості (D) та функції розподілу (W) густини ймовірності знаходження електрона у РТС. Було показано, що у всьому інтервалі зміни геометричних параметрів РТС резонансні енергії та ширини квазістаціонарних станів (КСС) електрона вірно визначаються лише функцією розподілу W, коли методи S-матриці та коефіцієнта прозорості мають певні межі застосування.

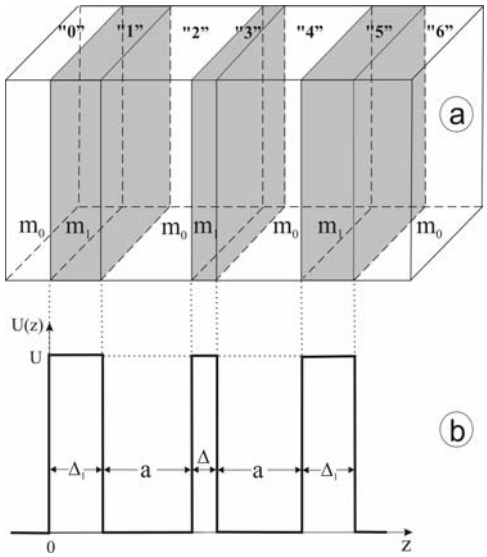

Рис. 1. Геометрична (a) та енергетична (b) схеми симетричної ТБРТС.

У пропонованій роботі в моделі прямокутних потенціальних бар'єрів та ефективних мас методом функції розподілу досліджено еволюцію та розщеплення РЕ та РШ важкої і легкої дірок у плоскій симетричній трибар'єрній РТС (ТБРТС).

I. S-матриця розсіювання та функція розподілу густини ймовірності знаходження дірки у симетричній трибар'єрній РТС

Розглядається плоска відкрита симетрична ТБРТС з геометричними параметрами, приведеними на рис. 1. Враховуючи, що величини постійних граток шарів-ям і бар'єрів відрізняються мало, будемо використовувати модель прямокутних потенціальних бар'єрів та ефективних мас.

У декартовій системі координат із початком посередині наносистеми ефективна маса та потенціальна енергія дірки мають вигляд

$$m(z)=\begin{cases} m_0, \\ m_1, \end{cases} \quad U(z)=\begin{cases} 0, & в \quad обл. \ "0", \ "2", \ "4", \ "6" \\ U, & в \quad обл. \ "1", \ "3", \ "5" \end{cases} \tag{1}$$

Розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера для дірки у РТС

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{\partial}{\partial z}\frac{1}{m(z)}\frac{\partial}{\partial z}+\frac{1}{m(z)}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\right)+U(z)\right)\Psi(x,y,z)=E\,\Psi(x,y,z) \tag{2}$$

шукається у вигляді

$$\Psi(x,y,z)=\Psi(z)\Psi_{k_{||}}(x,y)=\frac{1}{L}\Psi(z)\,e^{i\vec{k}_{||}(x\vec{n}_x+y\vec{n}_y)}. \tag{3}$$

Тут $\vec{k}_{||}$ – квазіімпульс дірки; L – довжина основної області у площині X0Y.

Для функції $\Psi(z)$, із урахуванням (2) та (3), отримується рівняння

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dz}\frac{1}{m(z)}\frac{d}{dz}+U(z)+\frac{\hbar^2k_{||}^2}{2m(z)}\right)\Psi(z)=E\Psi(z) \tag{4}$$

розв'язок якого компактно може бути записаний у вигляді

$$\begin{aligned}\Psi(z)&=\Psi_0(z)\theta(-z)+\sum_{p=1}^{5}\Psi_p(z)\left[\theta(z-z_{p-1})-\theta(z-z_p)\right]+\Psi_6(z)\theta(z-z_5)=\\ &=\left\{A_0e^{ik_0z}+Se^{-ik_0z}\right\}\,\theta(-z)+\sum_{p=1}^{5}\left\{A_pe^{ik_pz}+B_pe^{-ik_pz}\right\}\,\left[\theta(z-z_{p-1})-\theta(z-z_p)\right]+\left\{Se^{ik_6z}+A_6e^{-ik_6z}\right\}\,\theta(z-z_5),\end{aligned} \tag{5}$$

де

$$z_0=0;\quad z_1=\Delta_1;\quad z_2=b+\Delta_1;\quad z_3=b+\Delta_1+\Delta;\quad z_4=2b+\Delta_1+\Delta;\quad z_5=2(b+\Delta_1)+\Delta;$$
$$k_0=k_2=k_4=k_6=k_\perp=\hbar^{-1}\sqrt{2m_0E-\hbar^2k_{||}^2};\quad k_1=k_3=k_5=-i\chi=-i\hbar^{-1}\sqrt{2m(U-E)+\hbar^2k_{||}^2}.$$

Граничні умови неперервності хвильових функцій і потоків густин ймовірностей на всіх межах наноструктури

$$\left.\begin{aligned}&\Psi_p(z_p)=\Psi_{p+1}(z_p),\\ &\frac{1}{m_p}\frac{d\Psi_p(z)}{dz}\bigg|_{z=z_p}=\frac{1}{m_{p+1}}\frac{d\Psi_{p+1}(z)}{dz}\bigg|_{z=z_p}\end{aligned}\right\}\quad (p=0,\ \ldots,\ 5). \tag{6}$$

разом з умовою нормування (при фіксованому значенні $k_{||}$)

$$\int_{-\infty}^{\infty}\Psi_{k'_\perp}^*(z)\Psi_{k_\perp}(z)dz=\delta(k_\perp-k'_\perp) \tag{7}$$

однозначно визначають усі невідомі коефіцієнти A_p, B_p через трансфер-матрицю системи [12].

Для досліджуваної системи трансфер-матриця T має вигляд

$$T=\begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{12}^* & t_{11}^*\end{pmatrix}=\prod_{p=0}^{5}\begin{pmatrix} t_{11}^{p,p+1} & t_{12}^{p,p+1} \\ t_{21}^{p,p+1} & t_{22}^{p,p+1}\end{pmatrix}, \tag{8}$$

де

$$t_{fg}^{p,p+1} = \frac{1}{2}\left[1+(-1)^{f+g}\frac{m_p k_{p+1}}{m_{p+1}k_p}\right] e^{iz_p\left[(-1)^f k_p+(-1)^{g+1}k_{p+1}\right]}, \quad f,g=1,2;\ p=0,\ldots,5 \qquad (9)$$

Для визначення аналітичного вигляду S-матриці розсіювання з граничних умов (6) отримується квадратне рівняння, яке має два розв'язки

$$S^{(1,2)}(k_\perp) = e^{-ik_\perp z_5}\frac{1+i\,Z^{(1,2)}(k_\perp)}{1-i\,Z^{(1,2)}(k_\perp)}, \qquad (10)$$

де

$$Z^{(1,2)}(k_\perp) = \frac{Re\left(t_{12}\right)\left(Im\left(t_{21}\right)+Im\left(t_{11}e^{-ik_\perp z_5}\right)\right)}{\left|t_{12}\right|^2+Im\left(t_{21}\right)\ Im\left(t_{11}e^{-ik_\perp z_5}\right)\mp Re\left(t_{12}\right)\sqrt{\left|t_{12}\right|^2-\left(Im\left(t_{11}e^{-ik_\perp z_5}\right)\right)^2}} \qquad (11)$$

дійсні функції, що визначаються всіма елементами трансфер-матриці (8).

Хвильова функція дірки зовні наносистеми тепер може бути представлена у вигляді лінійної комбінації

$$\Psi_{0(6)}(z) = A^{\mp}\left(e^{\pm ik_\perp z}+S\ e^{\mp ik_\perp z}\right) \qquad (12)$$

із відповідними коефіцієнтами $A^{\mp}$ та S-матрицею розсіювання

$$A^{\pm} = A_{0(6)}^{(1)} + A_{0(6)}^{(2)},$$

$$S = \frac{A_{0(6)}^{(1)}S^{(1)} + A_{0(6)}^{(2)}S^{(2)}}{A^{\pm}}. \qquad (13)$$

Оскільки $E_\perp = \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_1} = E - \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m_1}$, то при фіксованому значенні $k_{||}$, здійснивши аналітичне продовження S-матриці у комплексну площину квазіімпульсів $k_\perp = k'_\perp - ik''_\perp$ або енергій $E_\perp = E'_\perp - iE''_\perp$ отримуються рівняння

$$Re\left(S(E_\perp)\right)^{-1} = 0,\ Im\left(S(E_\perp)\right)^{-1} = 0. \qquad (14)$$

для визначення РЕ та РШ КСС дірки у ТБРТС.

Хвильова функція (5), при заданому $k_{||}$, дозволяє виконати точний аналітичний розрахунок функції розподілу густини ймовірності знаходження дірки у ТБРТС

$$W(k_\perp) = \frac{1}{z_5}\int_{z_0}^{z_5}\left|\Psi_{k_\perp}(z)\right|^2 dz = \frac{1}{\pi\ z_5}\left[\frac{\frac{dZ^{(1)}(k_\perp)}{dk_\perp}-\frac{Z^{(1)}(k_\perp)}{k_\perp}}{1+\left(Z^{(1)}(k_\perp)\right)^2}+\frac{\frac{dZ^{(2)}(k_\perp)}{dk_\perp}-\frac{Z^{(2)}(k_\perp)}{k_\perp}}{1+\left(Z^{(2)}(k_\perp)\right)^2}\right]. \qquad (15)$$

Далі будемо досліджувати діркові стани, вважаючи, що $k_{||} = 0$, отже $k = k_\perp$, $E = E_\perp$.

II. Аналіз еволюції спектральних параметрів КСС важкої та легкої дірок у ТБРТС

Розрахунок резонансних енергій і ширин важкої (hh) та легкої (hl) дірок у відкритій симетричній ТБРТС виконувався на прикладі наносистеми $In_{0.25}Ga_{0.75}As/GaAs$ із фізичними параметрами:

$$m_0^{hh} = 0.478\ m_e;\ m_1^{hh} = 0.5\ m_e;\ m_0^{hl} = 0.068\ m_e;\ m_1^{hl} = 0.082\ m_e; U^{hh} = U^{hl} = 400meV$$

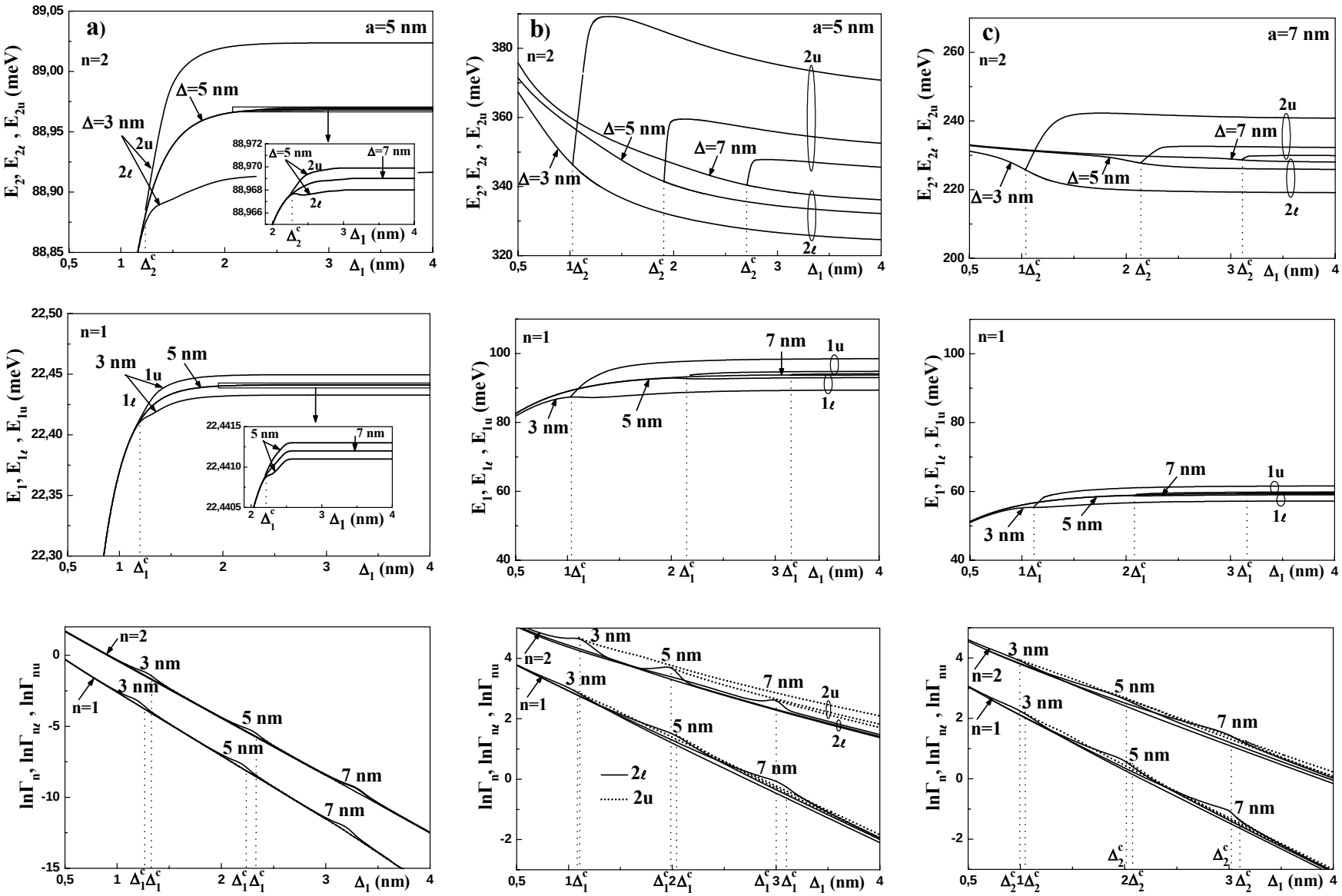

Рис. 2. Еволюція і розщеплення резонансних енергій ($E_n, E_{n\ell}, E_{nu}$) і ширин ($\Gamma_n, \Gamma_{n\ell}, \Gamma_{nu}$) перших двох пар (n=1; 2) КСС важкої (a) та легкої (b, c) дірок при зміні товщини зовнішніх бар'єрів Δ_1 симетричної ТБРТС.

(m_e – маса електрона у вакуумі)

На рис. 2 приведена еволюція резонансних енергій ($E_n, E_{n\ell}, E_{nu}$) і, у логарифмічній шкалі, ширин ($\Gamma_n, \Gamma_{n\ell}, \Gamma_{nu}$) перших двох пар КСС (n=1; 2) важкої (рис. 2a, $a = 5nm; \Delta = 3; 5; 7nm$) і легкої (рис. 2b, c, $a = 5; 7nm; \Delta = 3; 5; 7nm$) дірок при зміні товщини зовнішнього бар'єра (Δ_l) ТБРТС. Спектральні параметри (РЕ та РШ) розраховувалися методом функції розподілу густини ймовірності знаходження квазічастинки у РТС [11], який, у порівнянні із методом коефіцієнта прозорості, є більш адекватним, оскільки дає вірні результати в усій області зміни геометричних параметрів наносистеми.

З рис. 2 видно, що при збільшенні товщини зовнішнього бар'єра (Δ_l), незалежно від ширини ями (a), у околі критичної товщини Δ_n^c, спостерігається розщеплення РЕ (E_n) та РШ (Γ_n) КСС як важкої (рис. 2a), так і легкої дірки (рис. 2b, c). Тому пари розщеплених станів нумеруються подвійним індексом: nℓ – нижній, nu – верхній стани n-ої пари КСС дірки. Незважаючи на суттєву різницю величин ефективних мас важкої та легкої дірок якісних відмінностей у поведінці їх РЕ ($E_n, E_{n\ell}, E_{nu}$) і РШ ($\Gamma_n, \Gamma_{n\ell}, \Gamma_{nu}$) немає, тому далі аналіз та зроблені висновки стосуватимуться обох квазічастинок.

Зі збільшенням Δ_l положення енергій ($E_{n\ell}, E_{nu}$) n-ої пари квазістаціонарних станів дірки виходять на насичення (рис. 2), сягаючи відповідних значень стаціонарних станів (E_N^{close}) закритої двоямної наносистеми ($\Delta_1 \to \infty$), а ширини розщепленої пари ($\Gamma_{n\ell}, \Gamma_{nu}$) КСС дірки експоненційно спадають до нуля.

Збільшення товщини внутрішнього бар'єра (Δ) ТБРТС, за фіксованих розмірів ями, зміщує величину критичної товщини (Δ_n^c) зовнішнього бар'єра, в околі якої відбувається розщеплення РЕ та РШ вироджених КСС дірки, у сторону більших значень. З рис. 2 видно, що критичне значення Δ_n^c, для першого (n=1) та другого (n=2) виродженого КСС, не перевищує половину товщини внутрішнього бар'єра (Δ), тобто $\Delta_n^c \approx \Delta / 2$. Величина розщеплення РЕ ($E_{nu} - E_{n\ell}$), зі збільшенням товщини Δ, зменшується, а РШ ($\Gamma_{n\ell}, \Gamma_{nu}$) КСС дірки, майже не змінюються. Отже зміною товщини внутрішнього бар'єра ТБРТС можна керувати відстанню ($E_{nu} - E_{n\ell}$) між рівнями розмірного квантування розщепленої n-ої пари КСС дірки, майже, без зміни їх ширин. Слід відмітити, що у випадку $\Delta = 7nm$ (рис. 2a) розщеплення обох (n=1; 2) вироджених КСС важкої дірки відсутнє, коли відстань між резонансними рівнями енергії ($E_{n\ell}, E_{nu}$) легкої дірки (рис. 2b) ще існує.

З рис. 2 видно, що при збільшенні ширини ями (a) ТБРТС положення вироджених (E_n) та розщеплених ($E_{n\ell}, E_{nu}$) КСС дірки зміщується у низькоенергетичну область спектра. Не впливаючи на величину критичної товщини (Δ_n^c) зовнішнього бар'єра, збільшення ширини ями (a), зменшує відстань між розщепленими резонансними рівнями енергій ($E_{n\ell}, E_{nu}$) КСС та їх ширини ($\Gamma_{n\ell}, \Gamma_{nu}$).

Висновки

У роботі в моделі прямокутних потенціалів та ефективних мас на прикладі симетричної трибар'єрної резонансно-тунельної системи $In_{0.25}Ga_{0.75}As/GaAs$ методом функції розподілу густини ймовірності досліджено еволюцію та розщеплення резонансних рівнів енергій і ширин квазістаціонарних станів важкої й легкої дірок.

Показано, що при зміні геометричних параметрів ТБРТС поведінка спектральних характеристик (РЕ та РШ) КСС важкої й легкої дірок якісно однакова.

Зі збільшенням товщини зовнішнього бар'єра наносистеми в околі критичного значенні Δ_n^c відбувається розщеплення РЕ та РШ вироджених КСС дірок на пари. Критичне значення Δ_n^c визначається лише розмірами внутрішнього бар'єра і не перевищує половину його товщини.

Сеті Ю.О. – кандидат фізико-математичних наук, асистент кафедри теоретичної фізики.

[1] C. Gmachl, F. Capasso, D.L. Sivco, A.Y. Cho. Recent progress in quantum cascade lasers and applications // *Rep.Prog.Phys.* **64**, P.1533-1601 (2001).
[2] A.K.M. Newaz, W. Song, E.E. Mendez, Y. Lin, J. Nitta. Shot-noise characteristics of triple-barrier resonant-tunneling diodes // *Phys.Rev.B*, **71**, pp. 195303-195308 (2005).
[3] A. Orihashi, B. Suzuki, C. Asada. One THz harmonic oscillation of resonant tunneling diodes // *Appl. Phys. Lett*. **87**, p.233501 (2005).
[4] Э.А. Гельвич, Е.И.Голант, А.Б.Пашковский. Когерентный квантовый каскадный лазер на комбинации четных и нечетных уровней трехбарьерной структуры // *Письма ЖТФ*, **32**, сс. 13-18 (2006).
[5] В.Ф. Елесин. Высокочастотный отклик двухъямных наноструктур // *ЖЭТФ*. **127**, С.131-140 (2005).
[6] Л.К. Орлов, Н.Л. Ивина, Ю.А. Романов, Р.А. Рубцова. Исследование туннельных характеристик барьера в двойной квантовой яме $In_{0.25}Ga_{0.75}As$/ GaAs/$In_{0.25}Ga_{0.75}As$ // *ФТТ*. **42**, сс. 537-541 (2000).
[7] J. Faist, F. Capasso, D.L. Sivco, C. Sirtori, A.L. Hutchinson, A.Y. Cho. Quantum Cascade Laser // *Science.* **264**, pp. 553-556 (1994).
[8] J. Faist, F. Capasso, C. Sirtori. Vertical transition quantum cascade laser with Bragg confined excited state // *Appl. Phys. Lett*. **66**, pp. 538-540 (1995).
[9] M. Tkach, V.Holovatsky, O.Voitsekhivska. Electron and hole quasistationary states in opened cylindrical quantum wire // *Physica E: Low Dim.Struct*. **11**, pp. 17-26 (2001).
[10] Н.В.Ткач, Ю.А.Сети, Г.Г. Зегря. Электронные свойства открытых полупроводниковых квантовых точек // *Письма ЖТФ*. **33** (1), сс. 70-80 (2007).
[11] Н. В.Ткач, Ю. А.Сети. Эволюция и коллапс квазистационарных состояний электрона в плоских симметричных трехбарьерных резонансно-туннельных структурах // *Физика низких температур,* **35**, сс. 710-720 (2009).
[12] G.H. Davies. *The physics of low-dimensional semiconductor*, Cambridge university press, Cambridge, 438 p. (1998).

Ju.O. Seti

Evolution of Spectral Parameters of Heavy and Light Holes in Three Barrier Resonance Tunnel Structure

Chernivtsi National University 2, Kotsyubynskyi Str., Chernivtsi 58012,
Ukraine, tel.: (803722)4-48-16, e-mail: ktf@chnu.edu.ua

The evolution and splitting of degenerated quasi-stationary states of heavy and light holes due to the varying of outer barriers intensities are investigated within the effective masses model and rectangular potential barriers in symmetric three barrier resonance tunnel structure using the method of distribution function.

It is shown that the evolutions of resonance energies and widths of all quasi-stationary states of heavy and light holes are qualitatively equal. The splitting of degenerated quasi-stationary states of both quasi-particles occurs in the vicinity of critical magnitudes of outer barrier thicknesses not exceeding the half of inner one thickness.

Key words: resonance tunnel structure, quasi-stationary state, heavy and light hole.