УДК 621.315

ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ВАЛЕНТНОЙ ЗОНЕ ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ ZnSe

А.В. КАЗАРЯН, А.Х. МАНАСЕЛЯН, А.А. КИРАКОСЯН

Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 9 июня 2010 г.)

Исследованы электронные состояния в валентной зоне цилиндрической квантовой точки ZnSe с учетом сложной структуры валентной зоны. Рассчитаны волновые функции и энергетические уровни в зависимости от радиуса квантовой точки. Рассмотрено также влияние магнитного поля, направленного вдоль оси квантовой точки, на энергетические уровни.

1. Введение

Метод эффективной массы, успешно применяемый при определении волновых функций и спектра энергии в полупроводниках с простой зонной структурой [1], был обобщен для полупроводников со сложной структурой валентной зоны Коном и Латтинджером [1–4]. Ими получен матричный вид гамильтониана для зон тяжелых и легких дырок (т.н. гамильтониан Латтинджера в четырехзонном приближении) как без учета, так и с учетом спин–орбитального взаимодействия. В работе [4] рассмотрен более общий случай и приведен обобщенный гамильтониан Латтинджера, в котором учтены зона проводимости Γ_6 , зона тяжелых и легких дырок Γ_8 и расщепленная зона Γ_7 (т.н. восьмизонное приближение).

В низкоразмерных полупроводниковых гетероструктурах для определения электронных состояний применяются два разных подхода. При первом подходе [5] вначале определяются волновая функция и энергия валентного электрона для массивной системы, а энергия и волновая функция для низкоразмерной системы определяются затем из граничных условий. В рамках этого подхода волновая функция электрона определяется точно, однако его обобщение для более сложных низкоразмерных структур является довольно сложной задачей [6,7]. В рамках второго подхода [8–11] волновая функция электрона для низкоразмерной полупроводниковой гетероструктуры со сложной структурой валентной зоны разлагается по волновым функциям системы в однозонном приближении, и рассчитывается действие полного гамильтониана (в который, конечно, входит и гамильтониан Латтинджера) на эту функцию. Далее задача сводится к проблеме собственных значений и собственных векторов, которую можно решить численными методами, сохранив конечное число функций в разложении. Этот метод позволяет, хотя и приближенно, вычислить

энергию электрона и его волновую функцию для всех низкоразмерных систем, для которых энергии и волновые функции известны в однозонном приближении.

В данной работе определены энергетические уровни и волновые функции электрона в цилиндрической квантовой точке (КТ) со сложной структурой валентной зоны методом, основанным на разложении искомых волновых функций по волновым функциям однозонного приближения. В расчетах КТ аппроксимируется цилиндрической прямоугольной ямой конечной глубины, заключенной между двумя бесконечными стенками. Рассмотрено также влияние направленного вдоль оси квантовой точки магнитного поля на уровни энергии и волновые функции электрона.

2. Теория

Рассмотрим энергетические уровни валентного электрона в цилиндрической КТ, ограничивающий потенциал которой можно представить в виде

$$V(\rho) = \begin{cases} 0, \rho \le R \\ -V, R \le \rho \le D, \quad V \perp (z) = \begin{cases} 0, |z| \le L/2 \\ -\infty, \rho > D \end{cases}$$
(1)

где *R*, *D* и *L* – размеры КТ, соответственно, в плоскости *xy* и в направлении *z*.

В полупроводниках со сложной структурой валентной зоны кинетическая энергия валентного электрона определяется с помощью гамильтониана Латтинджера, который для зон тяжелых и легких дырок в цилиндрической аппроксимации имеет вид [1,2,5]

$$\hat{H}_{\Gamma_{g}} = \frac{\begin{vmatrix} 3/2 \\ |1/2 \\ |-1/2 \\ |-1/2 \\ |-3/2 \\ \end{vmatrix}} \begin{pmatrix} T/2 & -iL & -M & 0 \\ iL^{*} & T/6 + 2Q/3 & 0 & -M \\ -M^{*} & 0 & T/6 + 2Q/3 & iL \\ 0 & -M^{*} & -iL^{*} & T/2 \\ \end{pmatrix} \frac{\hbar^{2}}{2m_{0}},$$
(2)

где m_0 – масса электрона в вакууме,

$$-\frac{T}{2} = (\gamma_{1} + \gamma_{2})(k_{x}^{2} + k_{y}^{2}) + (\gamma_{1} - 2\gamma_{2})k_{z}^{2}, \quad -\left(\frac{T}{6} + \frac{2Q}{3}\right) = (\gamma_{1} - \gamma_{2})(k_{x}^{2} + k_{y}^{2}) + (\gamma_{1} + 2\gamma_{2})k_{z}^{2},$$
$$-L = -i2\sqrt{3}\gamma_{3}k_{-}k_{z}, \quad -M = \sqrt{3}\gamma k_{-}^{2}, \quad \gamma = \frac{2\gamma_{2} + 3\gamma_{3}}{5}, \quad \mathbf{k} = -i\nabla, \quad k_{\pm} = k_{x} \pm ik_{y},$$

 γ_1 , γ_2 , γ_3 – параметры Латтинджера. Для гамильтониана Латтинджера в качестве базисных функций применялись центрозонные (**k** = 0) блоховские функции $|J,J_z\rangle$ валентной зоны Γ_8 (J = 3/2), представленные в кратком виде $|J_z\rangle$, где J – полный момент валентного электрона, а J_z – его проекция на направление оси z. Эти блоховские функции можно представить в виде [1,5]

$$\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|X\rangle + i|Y\rangle\right)|\uparrow\rangle, \quad \left|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|X\rangle - i|Y\rangle\right)|\downarrow\rangle,$$
$$\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left[2|Z\rangle|\uparrow\rangle - \left(|X\rangle + i|Y\rangle\right)|\downarrow\rangle\right], \quad \left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left[2|Z\rangle|\downarrow\rangle + \left(|X\rangle - i|Y\rangle\right)|\uparrow\rangle\right],$$

где $|X\rangle$, $|Y\rangle$ и $|Z\rangle$ – орбитальные функции с симметрией *x*, *y* и *z*, соответственно. Полный гамильтониан системы можно представить в виде

$$\hat{H}_{1} = \hat{H}_{\Gamma_{8}} + V(\rho) + V_{\perp}(z), \qquad (3)$$

а волновую функцию валентного электрона – в виде [8,9]

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{J_z} |3/2, J_z\rangle F_{J_z}(\mathbf{r}), \qquad (4)$$

где $F_{J_z}(\mathbf{r})$ – огибающие волновых функций, определяемые из системы уравнений

$$\sum_{J'_{z}} \left[H_{J_{z}J'_{z}}\left(-i\nabla\right) + V\left(\rho\right) + V_{\perp}\left(z\right) \right] F_{J'_{z}}\left(\mathbf{r}\right) = EF_{J_{z}}\left(\mathbf{r}\right).$$
(5)

Поскольку ограничивающий потенциал обладает цилиндрической симметрией, удобно перейти от одночастичной задачи к "двухчастичной", т.е. рассматривать "блоховскую частицу" с собственным моментом \hat{J} и "огибающую частицу" с собственным моментом \hat{L} . Из-за цилиндрической симметрии системы оператор Гамильтона \hat{H}_{Γ_8} коммутирует с оператором *z*-проекции суммарного момента $\hat{F}_z = \hat{J}_z + \hat{L}_z$, поэтому F_z будет интегралом движения с собственным значением

$$F_z = J_z + L_z. \tag{6}$$

Тогда волновую функцию электрона можно представить в виде

$$\Psi_{F_z}\left(\mathbf{r}\right) = \sum_{J_z} \left| 3/2, J_z \right\rangle F_{J_z}\left(\rho, z\right) e^{i\phi(F_z - J_z)}.$$
(7)

Перейдем к расчету энергетических уровней валентного электрона с массой $m = -m_0/(\gamma_1 + \gamma_2)$ в цилиндрической КТ в однозонном приближении. Ввиду аксиальной симметрии системы волновую функцию электрона можно представить в виде

$$\phi_{nls}(\mathbf{r}) = \Phi_{n,l}(\rho, \phi) f_s(z), \qquad (8)$$

где $f_s(z)$ характеризует состояния частицы в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме и имеет вид [8,9]

$$f_{s}(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \begin{cases} \cos(s(\pi/L)z), \ s = 2k - 1, \\ \sin(s(\pi/L)z), \ s = 2k, \ (k = 1, 2...). \end{cases}$$
(9)

В плоскости *ху* частица находится в цилиндрической прямоугольной потенциальной яме (1), и ее волновую функцию можно представить в виде [5]

$$\Phi_{nl}(\rho, \phi) = C_1 i^l e^{il\phi} \begin{cases} J_l(\alpha_{nl}\rho), & \rho \leq R, \\ C_2(K_l(\beta_{nl}\rho) + C_3 I_l(\beta_{nl}\rho)), & R < \rho \leq D, \\ 0, & \rho > D, \end{cases}$$
(10)

где $J_l(z)$, $I_l(z)$ и $K_l(z)$ – соответственно, функции Бесселя первого рода и модифицированные функции Бесселя первого и второго рода [12], C_1 , C_2 и C_3 – постоянные, определяемые из требований непрерывности и нормировки волновой функции, а α_{nl} и β_{nl} связаны с энергией электрона E_{nl} , определяемой из граничных условий, с помощью соотношений

$$\alpha_{nl} = \sqrt{\frac{-2m_0 E_{nl}}{\hbar^2 \left(\gamma_1 + \gamma_2\right)}}, \quad \beta_{nl} = \sqrt{\frac{2m_0 \left(V + E_{nl}\right)}{\hbar^2 \left(\gamma_1 + \gamma_2\right)}}.$$
(11)

Для определения энергии электрона в полупроводнике со сложной структурой валентной зоны волновую функцию электрона разложим по базисным функциям (8):

$$\Psi_{F_z}(\mathbf{r}) = \sum_{J_z,n,s} C(n,s,J_z) \phi_{n,F_z-J_z,s}(\mathbf{r}) |3/2,J_z\rangle.$$
(12)

После подстановки выражения (12) в уравнение (5) получим проблему собственных значений и собственных векторов, в которой в качестве собственных векторов фигурируют коэффициенты $C(n, s, J_z)$, а в качестве собственных значений – энергетические уровни электрона. Для определения результатов действия гамильтониана на функцию (12) воспользуемся следующими операторными соотношениями:

$$k_{\pm} \left(i^{l} J_{l} \left(\alpha_{nl} \rho \right) e^{il\phi} \right) = \alpha_{nl} \left(i^{l\pm 1} J_{l\pm 1} \left(\alpha_{nl} \rho \right) e^{i(l\pm 1)\phi} \right),$$

$$k_{\pm} \left(i^{l} K_{l} \left(\beta_{nl} \rho \right) e^{il\phi} \right) = \pm \beta_{nl} \left(i^{l\pm 1} K_{l\pm 1} \left(\beta_{nl} \rho \right) e^{i(l\pm 1)\phi} \right),$$

$$k_{\pm} \left(i^{l} I_{l} \left(\beta_{nl} \rho \right) e^{il\phi} \right) = \mp \beta_{nl} \left(i^{l\pm 1} I_{l\pm 1} \left(\beta_{nl} \rho \right) e^{i(l\pm 1)\phi} \right).$$
(13)

Перейдем к рассмотрению энергетических уровней валентного электрона в КТ, находящейся в постоянном однородном магнитном поле, направленном вдоль оси *z* КТ: **B**(0,0,B). Векторный потенциал магнитного поля удобно представить в виде

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \left[\mathbf{B}, \mathbf{r} \right] = \mathbf{A} \left(-\frac{1}{2} y B; \frac{1}{2} x B; 0 \right).$$
(14)

Согласно [3,9–11], в присутствии магнитного поля в гамильтониане Латтинджера следует перейти от оператора $\mathbf{k} = -i\nabla$ к оператору $\mathbf{k} = -i\nabla + e\mathbf{A}/\hbar$, а в полном

гамильтониане – добавить член зеемановского расщепления, имеющий вид [3,9–11]

$$\hat{H}_{z} = \begin{vmatrix} 3/2 \\ |1/2 \\ |-1/2 \\ |-1/2 \\ |-3/2 \end{vmatrix} \begin{pmatrix} -3\kappa/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\kappa/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \kappa/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3\kappa/2 \end{pmatrix} \hbar \omega_{B},$$
(15)

где κ – четвертый параметр Латтинджера, $\omega_B = eB/m_0$ – циклотронная частота. Полный гамильтониан рассматриваемой системы в магнитном поле имеет следующий вид:

$$\hat{H}_{2} = \hat{H}_{\Gamma_{8}} + V(\rho) + V_{\perp}(z) + \hat{H}_{Z},$$
(16)

а огибающие функции удовлетворяют системе уравнений

$$\sum_{J'_{z}} \left[H_{J_{z}J'_{z}}\left(-i\nabla\right) + V\left(\rho\right) + V_{\perp}\left(z\right) + \hat{H}_{Z} \right] F_{J'_{z}}\left(\mathbf{r}\right) = EF_{J_{z}}\left(\mathbf{r}\right).$$
(17)

Магнитное поле не меняет аксиальную симметрию системы, поэтому F_z остается интегралом движения, и полную функцию электрона можно снова представить в виде (7). Переходя к рассмотрению движения валентного электрона в однозонном приближении, можно разделить переменные в волновой функции и представить ее в виде (8). Магнитное поле влияет на движение электрона в плоскости *ху*, поэтому волновая функция электрона в этой плоскости будет иметь вид

$$\Phi_{nl}(\rho, \varphi) = C_{1} \exp\left(-\frac{\rho^{2}}{4a_{B}^{2}}\right) \rho^{|l|} e^{il\varphi} \begin{cases} F\left(-\overline{\alpha}_{nl}, |l|+1, \frac{\rho^{2}}{2a_{B}^{2}}\right), & \rho \leq R, \\ C_{2}\left(F\left(-\overline{\beta}_{nl}, |l|+1, \frac{\rho^{2}}{2a_{B}^{2}}\right) + C_{3}U\left(-\overline{\beta}_{nl}, |l|+1, \frac{\rho^{2}}{2a_{B}^{2}}\right)\right), & R < \rho \leq D, \end{cases}$$
(18)

где $F(\alpha,\beta,z)$ и $U(\alpha,\beta,z)$ – вырожденные гипергеометрические функции первого и второго рода, соответственно [12], $\lambda_B = (\hbar/eB)^{1/2}$ – магнитная длина, а квантовые числа $\overline{\alpha}_{nl}$ и $\overline{\beta}_{nl}$ связаны с энергией электрона с помощью соотношений

$$\overline{\alpha}_{nl} = \frac{-E_{nl}}{(\gamma_1 + \gamma_2)\hbar\omega_B} - \frac{l+|l|+1}{2}, \quad \overline{\beta}_{nl} = -\frac{V+E_{nl}}{(\gamma_1 + \gamma_2)\hbar\omega_B} - \frac{l+|l|+1}{2}.$$
 (19)

После подстановки разложения (12) в систему уравнений (17) и используя операторные соотношения

$$\begin{aligned} k_{+}\left(t(\rho)\rho^{I}F\left(-\overline{\alpha}_{nl},l+1,\frac{\rho^{2}}{2\lambda_{B}^{2}}\right)e^{il\phi}\right) &= i\frac{\overline{\alpha}_{nl}+1+l}{\lambda_{B}^{2}(l+1)}\left(t(\rho)\rho^{I+1}F\left(-\overline{\alpha}_{nl},l+2,\frac{\rho^{2}}{2\lambda_{B}^{2}}\right)e^{i(l+1)\phi}\right), \ (l \geq 0), \\ k_{-}\left(t(\rho)\rho^{I}F\left(-\overline{\alpha}_{nl},l+1,\frac{\rho^{2}}{2\lambda_{B}^{2}}\right)e^{il\phi}\right) &= -2il\left(t(\rho)\rho^{I-1}F\left(-\overline{\alpha}_{nl},l,\frac{\rho^{2}}{2\lambda_{B}^{2}}\right)e^{i(l+1)\phi}\right), \ (l > 0), \\ k_{+}\left(t(\rho)\rho^{-I}F\left(-\overline{\alpha}_{nl},-l+1,\frac{\rho^{2}}{2\lambda_{B}^{2}}\right)e^{il\phi}\right) &= 2il\left(t(\rho)\rho^{-I-1}F\left(-\overline{\alpha}_{nl}-1,-l,\frac{\rho^{2}}{2\lambda_{B}^{2}}\right)e^{i(l+1)\phi}\right), \ (l < 0), \\ k_{-}\left(t(\rho)\rho^{-I}F\left(-\overline{\alpha}_{nl},-l+1,\frac{\rho^{2}}{2\lambda_{B}^{2}}\right)e^{il\phi}\right) &= \frac{i\overline{\alpha}_{nl}}{\lambda_{B}^{2}(1-l)}\left(t(\rho)\rho^{-I+1}F\left(-\overline{\alpha}_{nl}+1,-l+2,\frac{\rho^{2}}{2\lambda_{B}^{2}}\right)e^{i(l-1)\phi}\right), \ (l \leq 0), \\ k_{+}\left(t(\rho)\rho^{I}U\left(-\overline{\beta}_{nl},l+1,\frac{\rho^{2}}{2\lambda_{B}^{2}}\right)e^{il\phi}\right) &= -2i\left(l+\overline{\beta}_{nl}\right)\left(t(\rho)\rho^{I-1}U\left(-\overline{\beta}_{nl},l,\frac{\rho^{2}}{2\lambda_{B}^{2}}\right)e^{i(l-1)\phi}\right), \ (l \geq 0), \\ k_{+}\left(t(\rho)\rho^{-I}U\left(-\overline{\beta}_{nl},-l+1,\frac{\rho^{2}}{2\lambda_{B}^{2}}\right)e^{il\phi}\right) &= 2i\left(t(\rho)\rho^{-I-1}U\left(-\overline{\beta}_{nl}-1,-l,\frac{\rho^{2}}{2\lambda_{B}^{2}}\right)e^{i(l-1)\phi}\right), \ (l < 0), \\ k_{-}\left(t(\rho)\rho^{-I}U\left(-\overline{\beta}_{nl},-l+1,\frac{\rho^{2}}{2\lambda_{B}^{2}}\right)e^{il\phi}\right) &= 2i\left(t(\rho)\rho^{-I-1}U\left(-\overline{\beta}_{nl}-1,-l,\frac{\rho^{2}}{2\lambda_{B}^{2}}\right)e^{i(l-1)\phi}\right), \ (l < 0), \\ k_{-}\left(t(\rho)\rho^{-I}U\left(-\overline{\beta}_{nl},-l+1,\frac{\rho^{2}}{2\lambda_{B}^{2}}\right)e^{il\phi}\right) &= i\frac{i\overline{\beta}_{nl}}{\lambda_{B}^{2}}\left(t(\rho)\rho^{-I+1}U\left(-\overline{\beta}_{nl}+1,-l+2,\frac{\rho^{2}}{2\lambda_{B}^{2}}\right)e^{i(l-1)\phi}\right), \ (l < 0), \end{aligned}$$

(где для краткости записи использовано обозначение $t(\rho) = \exp(-\rho^2/4\lambda_B^2)$), опять придем к проблеме собственных значений и собственных векторов.

3. Обсуждение результатов

Численные расчеты проведены для цилиндрической КТ из ZnSe. Использованы следующие значения параметров: $\gamma_1 = 4.32$, $\gamma_2 = 0.66$, $\gamma_3 = 1.13$, $\kappa = -0.54$ [13], V = 200 мэB, D = 1000 Å, L = 50 Å и 100 Å, m_{\perp}^{hh} $-0.20m_0$, m_z^{hh} $-0.33m_0$, m_{\perp}^{lh} $-0.27m_0$, m_z^{lh} $-0.18m_0$.

В разложении (12) *n* и *s* могут принимать бесконечное число значений, поэтому для нахождения собственных значений энергии мы имеем дело с бесконечной системой уравнений. Согласно расчетам, энергия электрона сходится довольно быстро, поэтому мы ограничились пятью членами в разложениях по *n* и *s*, тем самым сводя проблему определения собственных значений и собственных векторов к решению системы из $4 \times 5 \times 5 = 100$ уравнений.

Заметим также, что вследствие аксиальной симметрии КТ собственные векторы либо четны, либо нечетны (на приводимых ниже графиках энергии четных состояний даны сплошными, а энергии нечетных состояний – пунктирными кривыми).

На рис.1а–d представлены зависимости энергетических уровней электрона от радиуса КТ для состояний с $F_z = 3/2$ для двух значений высоты КТ и индукции магнитного поля.

Как видно из рис.1а,b, основной уровень в яме при L = 50 Å и B = 0 появляется при радиусе R_0^{ev} 14.79 Å, а при B = 30 T – R_0^{ev} 14 Å. Для возбужденных состояний влияние магнитного поля более ощутимо. Так, для основного состояния относительное уменьшение $\left|\Delta R_0^{ev} / R_0^{ev}\right|$ 4.9%, а для первого

возбужденного состояния $\left| \Delta R_1^{odd} / R_1^{odd} \right|$ 12.3%. Для двух последующих уровней это уменьшение составляет, соответственно, 6.75% и 1.78%.



Рис.1. Зависимость энергетических уровней валентного электрона от радиуса КТ для $F_z = 3/2$ при L = 50 Å: a) B = 0, b) B = 30 T и при L = 100 Å: c) B = 0, d) B = 30 T.

Для КТ с L = 100 Å (рис.1с и d) при B = 0 R_0^{ev} 11.07 Å, а при B = 30 Т *R*₀^{*ev*} 10.21 Å. Имеющее место уменьшение поперечного радиуса КТ при увеличении ее высоты качественно можно объяснить следующим образом. Как известно [14], в сферической КТ с радиусом R₀ первый уровень энергии возникает при глубине потенциальной ямы $V \ge V_0 = \pi^2 \hbar^2 / 8m^* R_0^2$. Сопоставим теперь цилиндрической КТ некоторую сферическую КТ, радиус которой определим из условия равенства объемов цилиндрической и сферической КТ: $\pi R^2 L = 4\pi R_0^3/3$, учетом приведенного выше условия, или, с $R = \left(\pi^6 \hbar^6 / 288 m^{*3} V_0^3 L^2\right)^{1/4}$. Как видно, при заданных m^* и V_0 $R \sim L^{-1/2}$. Для количественной оценки введем эффективную массу *m*^{*} соотношением $3/m^* = 2/m_{\perp}^{hh} + 1/m_z^{hh}$, что для ZnSe дает значение $m^* = -0.23m_0$. Тогда, при B = 0для основного состояния в яме $V_0 = -200$ мэВ получаем при L = 50 Å R_0^{ev} 16 Å, а при L=100 Å R_0^{ev} 11.35 Å, что находится в хорошем соответствии с расчетными значениями (соответственно, 14.79 Å и 11.07 Å).

Следует также отметить, что зависимость $R \sim L^{-1/2}$ имеет место и для возбужденных состояний, хотя и с меньшей точностью, чем для основного состояния.

Из рис.1а, b также следует, что с увеличением поперечного радиуса КТ энергетические уровни приближаются к значениям, определяемым размерным квантованием по направлению оси *z*, что обусловлено ослаблением роли поперечного размерного квантования с увеличением радиуса КТ.

На рис.2 приведены графики зависимостей энергетических уровней от радиуса КТ при $F_z = -3/2$ для значений L = 50 Å (рис.2а) и L = 100 Å (рис.2b), когда индукция магнитного поля B = 30 Т (при B = 0 графики $F_z = -3/2$ и $F_z = 3/2$ совпадают, см. рис.1а,с).



Рис.2. Зависимость энергетических уровней валентного электрона от радиуса КТ для $F_z = -3/2$ при а) L = 50 Å, B = 30 T, b) L = 100 Å, B = 30 T.

На рис.3 представлены графики зависимости энергетических уровней от радиуса КТ при $|F_z| = 1/2$ при L = 50 Å и L = 100 Å.

В отличие от случая $F_z = \pm 3/2$, при $F_z = \pm 1/2$ происходит изменение в чередовании четных и нечетных состояний. Так, например, при B = 0 и L = 50 Å (рис.3а) состояния с $|F_z| = 1/2$ имеют порядок чередования even-odd-odd-even вплоть до значения R = 48 Å, а после значения R = 55 Å имеет место порядок чередования odd-even-even-odd. Усиление магнитного поля приводит к понижению основного уровня и перемещению области, где имеет место порядок чередования even-odd-odd-even, в область меньших $R: R \le 37$ Å. В области радиусов $R \sim 56 - 75$ Å имеет место порядок: odd-even-even-odd (рис.3b).

Для состояний с $F_z = -1/2$, L = 50 Å вплоть до значений $R \le 50$ Å имеет место чередование odd–even–even–odd (рис.3с).

Отмеченные закономерности чередований имеют место и при L = 100 Å, отличаясь от случая L = 50 Å только точками пересечений четных и нечетных состояний.

На рис.4 представлены графики зависимости энергетических уровней от индукции магнитного поля. Как видно, магнитное поле снимает вырождение, связанное со знаком F_z , поскольку оно взаимодействует с суммарным моментом. Однако, как видно из рис.4, энергетический уровень с положительным моментом выше, чем уровень с отрицательным моментом. Это

явление обратно тому, которое получается в однозонном приближении, и можно объяснить взаимодействием между зонами. Это явление наблюдается также для КТ с параболическим потенциалом в плоскости *xy* [9]. Такая же зависимость энергетических уровней от магнитного поля наблюдалась в работе [15] для больших значений радиусов КТ и нашла свое экспериментальное подтверждение в работе [16].



Рис.3. Зависимость энергетических уровней валентного электрона от радиуса КТ для L = 50 Å: a) $|F_z| = 1/2$, B = 0, b) $F_z = 1/2$, B = 30 T, c) $F_z = -1/2$, B = 30 T и для L = 100 Å: d) $|F_z| = 1/2$, B = 0, e) $F_z = 1/2$, B = 30 T, f) $F_z = -1/2$, B = 30 T.

Чтобы объяснить все явления, наблюдающиеся на рисунках, надо понять роль каждого члена в гамильтониане Латтинджера и его влияние на энергию электрона. В работе [5] показано, что полную волновую функцию электрона в валентной зоне можно представить как суперпозицию волновых функций легких и тяжелых дырок, и поэтому энергетические уровни электрона в валентной зоне не могут быть классифицированы как уровни только легких (lh) и тяжелых (hh) дырок, основываясь только на значениях их суммарного момента. Однако, как показано в работах [8–11], в граничных случаях ограничивающих потенциалов и магнитного поля можно предсказать, какой член будет доминировать в полной волновой функции и тем самым определить, какому типу дырок соответствует тот или иной энергетический уровень. Таким образом, относительную роль каждого члена в гамильтониане Латтинджера можно оценить в различных областях значений поперечных размеров КТ и индукции магнитного поля. В первой области, где квантование в направлении *z* намного сильнее, чем поперечное квантование, роль недиагональных элементов в гамильтониане Латтинджера незначительна, и все энергетические уровни стремятся к энергетическим уровням квантовой ямы по *z*-направлениям.



Рис.4. Зависимость энергетических уровней валентного электрона от индукции магнитного поля (R = 50 Å) для $F_z = \pm 3/2$: a) L = 50 Å, b) L = 100 Å и для $F_z = \pm 1/2$: c) L = 50 Å, d) L = 100 Å.

Во второй области, где преобладает ограничивающий потенциал в плоскости *ху*, взаимодействие между зонами значительно, и основная часть в энергии обусловлена тем членом в огибающей волновой функции, который обладает наименьшим абсолютным значением орбитального момента |l|. И наконец, в третьей области, где магнитная длина намного меньше размеров

ограничивающих потенциалов, энергетические уровни стремятся к уровням валентного электрона в магнитном поле. И как было показано в работе [9], для валентного электрона в магнитном поле для каждого $l \ge 0$ есть один энергетический уровень, для которого сложная структура валентной зоны не играет роли, и энергия этого уровня определяется в однозонном приближении.

Если сравнить энергетические уровни валентного электрона в квантовой нити [5] и в квантовой точке, определенные на рис.1–3, то можно увидеть, что в квантовой нити основное состояние соответствует суммарному моменту $|F_z|=1/2$, а для квантовой точки – состоянию $|F_z|=3/2$. Это можно объяснить следующим образом. По рассуждениям, представленным выше, квантовая нить соответствует квантовой точке во второй области, следовательно, для четных состояний с $|F_z|=1/2$ основная часть энергии обусловлена легкодырочным состоянием, а для состояний с $|F_z|=3/2$ – тяжелодырочным состоянием. Но, как видно из гамильтониана Латтинджера, в плоскости *ху* легкодырочным соответствует большая масса, чем тяжелодырочным, а в *z*-направлении – наоборот. Поэтому во второй области основному состоянию соответствует $|F_z|=1/2$, и когда размер образца по направлению *z* начинает уменьшаться, уровни с суммарным моментом $|F_z|=1/2$ и $|F_z|=3/2$ реагируют на это в обратном порядке, и начиная с некоторого значения радиуса КТ основным состоянием становится уровень с суммарным моментом $|F_z|=3/2$.

Как видно из рис.1, возбужденные состояния с разными четностями пересекаются друг с другом. Когда радиус ограничивающего потенциала в плоскости ху намного больше, чем размер образца по направлению z, все энергетические уровни, связанные с первой подзоной, стремятся к основному состоянию тяжелой дырки в квантовой яме. Но поскольку для нечетного состояния этому состоянию соответствует огибающая функция с большим орбитальным моментом, чем у четного состояния, то четное состояние будет выше по энергии. Во второй области, когда радиус ограничивающего потенциала в плоскости ху намного меньше, чем размер образца по направлению z, энергия нечетного состояния должна быть обусловлена волновой функцией с наименьшим орбитальным моментом, поэтому для этого уровня роль взаимодействия между зонами должна быть намного больше, чем для четного состояния. Но как следует из вариационного принципа [8,9], учет взаимодействия между зонами приводит к снижению энергии по абсолютной величине, и этим объясняется явление пересечения, наблюдающееся на рис.1. Этим же методом можно объяснить тот факт, что на рис.4 основной уровень соответствует суммарному моменту $|F_z| = 3/2$, а не $|F_z| = -3/2$, что имеет место в однозонном приближении. В первой области, где ограничивающий потенциал по направлению z преобладает, оба уровня стремятся к потолку подзоны тяжелой дырки. И поскольку огибающие функции в плоскости ху, связанные с этим членом огибающей функции по направлению z, для обоих случаев соответствуют орбитальному моменту l=0, то в этой области порядок уровней обусловлен зеемановским членом и соответствует порядку, имеющему место в однозонном

приближении. Когда ограничивающий потенциал в плоскости *ху* становится сравнимым с потенциалом в направлении *z*, то, как видно из рис.4, роль взаимодействия преобладает для уровня, соответствующего суммарному моменту $|F_z| = 3/2$, что, как было отмечено, приводит к уменьшению энергии по абсолютной величине по сравнению с уровнями, соответствующими суммарному моменту $|F_z| = -3/2$.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. W.W.Chow, S.W.Koch. Semiconductor-Laser Fundamentals. Berlin, Springer, 1999.
- 2. J.M.Luttinger, W.Kohn. Phys. Rev., 97, 869 (1955).
- 3. J.M.Luttinger. Phys. Rev., 102, 1030 (1956).
- 4. A.L.Efros, M.Rosen. Phys. Rev. B, 58, 7120 (1998).
- 5. P.C.Sercel, K.J.Vahala. Phys. Rev. B, 42, 3690 (1990).
- 6. М.М.Агасян, А.А.Киракосян. Изв. НАН Армении, Физика, 35, 179 (2000).
- 7. P.Janiszewski, M.Suffczynski. J. Phys.: Condens. Matter, 11, 6217 (1999).
- 8. F.B.Pedersen, Yia-Chung Chang. Phys. Rev. B, 53, 1507 (1996).
- 9. F.B.Pedersen, Yia-Chung Chang. Phys. Rev. B, 55, 4580 (1997).
- 10. D.A.Broido, A.Cros, U.Rössler. Phys. Rev. B, 45, 11395 (1992).
- 11. T.Darnhofer, D.A.Broido, U.Rössler. Phys. Rev. B, 50, 15412 (1994).
- 12. Справочник по специальным функциям. Под ред. М.Абрамовица, И.Стиган. М., Наука, 1979.
- 13. A.K.Bhattacharjee, J.Pérez-Conde. Phys. Rev. B, 68, 045303 (2003).
- 14. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика. М., Наука, 1989.
- 15. J.I.Climente, J.Planelles, M.Pi, F.Malet. Phys. Rev. B, 72, 233305 (2005).
- J.H.Blokland, F.J.P.Wijnen, P.C.M.Christianen, U.Zeitler, J.C.Maan, P.Kailuweit, D.Reuter, A.D.Wieck. Phys. Rev. B, 75, 233305 (2007).

էԼԵԿՏՐՈՆԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ ZnSe ԳԼԱՆԱՅԻՆ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԿԵՏԻ ՎԱԼԵՆՏԱԿԱՆ ԳՈՏՈՒՄ

Ա.Վ. ՂԱԶԱՐՅԱՆ, Ա.Խ. ՄԱՆԱՍԵԼՅԱՆ, Ա.Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ

Հետազոտված են էլեկտրոնային վիձակները ZnSe գլանային քվանտային կետի վալենտական գոտում նրա բարդ կառուցվածքի հաշվառմամբ։ Հաշվարկված են ալիքային ֆունկցիաները և էներգիական մակարդակները՝ կախված քվանտային կետի շառավղից։ Դիտարկված է նաև քվանտային կետի առանցքով ուղղված մագնիսական դաշտի ազդեցությունը էներգիական մակարդակների վրա։

ELECTRONIC STATES IN THE VALENCE BAND OF A CYLINDRICAL ZnSe QUANTUM DOT

A.V. GHAZARYAN, A.Kh. MANASELYAN, A.A. KIRAKOSYAN

The valence band electronic states in a cylindrical ZnSe quantum dot are investigated by taking into account the valence band mixing. Dependences of the wave functions and energy levels on the quantum dot radius are obtained. Influence of a magnetic field parallel to the quantum dot axis on the energy levels is also considered.