

# Резонансное рассеяние в квантовых ямах с нанодцентрами

А. М. Сатанин<sup>1)</sup>, В. Б. Штенберг

Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского, 603600, Нижний Новгород, Россия

Поступила в редакцию 3 января 2002 г.

Показано, что в 2D электронных слоях нанодцентры конечного радиуса (квантовые точки, доноры) могут приводить к возникновению резонансов Фано в сечении рассеяния. Вычислен резонансный вклад в остаточное сопротивление.

PACS: 03.65.Ge, 73.20.-r, 73.40.Gk

Интерференционные явления, тесно связанные с асимметричными резонансами Фано [1], ранее активно изучались теоретически и экспериментально при фотоионизации атомов [2], электронном и нейтронном рассеянии [3, 4], рамановском рассеянии [5], фотоабсорбции в квантовых ямах и сверхрешетках [6, – 8]. Недавно резонансы Фано были обнаружены в электронном транспорте через 1D квантовый канал [9, 10]. Резонансы можно рассматривать как квантовые “зонды”, несущие важную информацию о геометрическом рельефе и внутренних потенциальных полях низкоразмерных структур. Представляет интерес поиск новых эффектов, связанных с конфигурационным взаимодействием состояний различного типа в низкоразмерных системах.

В данной работе выполнено исследование резонансов Фано в 2D системах и вычислен их вклад в остаточное сопротивление. В качестве модели рассмотрена квантовая яма, состояния которой интерферируют с нанодцентрами (например, с донорными состояниями  $\delta$ -слоя или с состояниями квантовых точек). Показано, что локализованные на центрах состояния приводят к появлению дополнительных асимметричных пиков в зависимости сопротивления от энергии Ферми.

Будем полагать известными состояния поперечного движения  $\varphi_n(z)$  и соответствующие энергетические уровни  $E_n$  электрона в идеальной квантовой яме шириной  $W$  (ось  $z$  направлена перпендикулярно плоскости 2D слоя). Пусть уединенный квантовый центр описывается функцией  $V(x, y, z - Z_0)$ , где  $Z_0$  задает положение центра относительно плоскости симметрии квантовой ямы. Волновую функцию представим в виде разложения по полному базису функций поперечного движения  $\Psi(x, y, z) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(x, y) \varphi_n(z)$ . Уравнение Шредингера приводит к

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi_n(x, y) + \sum_{n'=1}^{\infty} V_{nn'}(x, y) \psi_{n'}(x, y) = (E - E_n) \psi_n(x, y), \quad (1)$$

где

$$V_{nn'}(x, y) = \int \varphi_n(z) V(x, y, z - Z_0) \varphi_{n'}(z) dz \quad (2)$$

– матричные элементы потенциала центра,  $m^*$  – эффективная масса электрона.

Предположим, что центр рассеяния обладает осью симметрии и будем интересоваться состояниями электрона в интервале энергий  $E_1 < E < E_2$ . Волновая функция в открытом канале рассеяния может быть представлена в виде

$$\psi_1(r, \theta) = e^{ik_1 r \cos \theta} + \frac{f(\theta)}{\sqrt{r}} e^{ik_1 r}, \quad (3)$$

где  $k_1 = \sqrt{2m^*(E - E_1)}/\hbar$  – волновой вектор в первой зоне,  $r$  и  $\theta$  – координаты в плоскости слоя. Волновые функции запишем в виде

$$\psi_n(r, \theta) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im\theta} \psi_{n,m}(r). \quad (4)$$

Из уравнения (1) можно получить уравнения для амплитуд  $\psi_{n,m}(r)$ . Коэффициенты разложения амплитуды  $f(\theta)$  выражаются через  $S$ -матрицу или фазы рассеяния:

$$f_m = \sqrt{\frac{2}{\pi k_1}} i^m e^{-i(\pi m/2 - \pi/4)} (S_m - 1), \quad (5)$$

$$S_m = e^{2i\delta_m} - 1,$$

а парциальные сечения определяются выражением

$$\sigma_m = \frac{\pi}{k_1} \sin^2(\delta_m). \quad (6)$$

<sup>1)</sup>e-mail: satanin@phys.unn.runnet.ru

Действуя согласно [11], нетрудно выразить остаточное сопротивление, обусловленное ансамблем квантовых точек, через фазы рассеяния

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{n_i \hbar}{e^2 n} \int_0^{2\pi} |f(\theta)|^2 (1 - \cos \theta) = \\ &= \frac{2n_i \hbar}{e^2 n} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sin^2(\delta_m - \delta_{m+1}), \end{aligned} \quad (7)$$

где  $n_i$  - 2D плотность рассеивателей,  $n$  - концентрация электронов.

Если энергия электрона близка к группе уровней в потенциальной яме  $V_{22}(r)$ , то именно эти связанные состояния будут наиболее сильно интерферировать с падающей волной. В резонансном приближении [12] можно сохранить только самые близкие по энергии (резонансные) слагаемые в системе уравнений (1). При этом мы будем принимать во внимание произвольное число возможных связанных состояний в поле центра. Иными словами, мы удержим в (1) слагаемые, содержащие  $\psi_{1,m}$  и  $\psi_{2,m}$ :

$$\begin{aligned} \left( -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + V_{11,m}(r) \right) \psi_{1,m}(r) + \\ + V_{12}(r) \psi_{2,m}(r) = (E - E_1) \psi_{1,m}(r), \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \left( -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + V_{22,m}(r) \right) \psi_{2,m}(r) + \\ + V_{21}(r) \psi_{1,m}(r) = (E - E_2) \psi_{2,m}(r), \end{aligned} \quad (9)$$

где диагональные матричные элементы  $V_{11,m}$  и  $V_{22,m}$  включают в себя центробежную энергию. Отметим, что мы считаем выполненным условие, согласно которому матричный элемент  $V_{12}$ , описывающий связь между каналами, мал по сравнению с расстоянием между подзонами квантования.

Сначала построим состояния потенциального рассеяния для 1D уравнения:

$$\begin{aligned} \left( -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + V_{11,m}(r) \right) \chi_m^{1,2}(r) = \\ = (E - E_1) \chi_m^{1,2}(r). \end{aligned} \quad (10)$$

Для потенциала конечного радиуса в качестве линейно независимых решений можно выбрать функции  $\chi_m^{1,2}(r)$ , имеющие следующие асимптотики при  $r \rightarrow +\infty$ :

$$\begin{aligned} \chi_m^1(r) &\rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi k_1 r}} \cos \left( k_1 r - \frac{\pi m}{2} - \frac{\pi}{4} + \delta_m^p \right), \\ \chi_m^2(r) &\rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi k_1 r}} \sin \left( k_1 r - \frac{\pi m}{2} - \frac{\pi}{4} + \delta_m^p \right), \end{aligned} \quad (11)$$

где  $\delta_m^p$  - сдвиг фазы при потенциальном рассеянии. Формальное решение уравнения (8) можно записать в виде

$$\psi_{1,m}(r) = \chi_m^1(r) + \int_0^{\infty} dr' r' G_{1,m}(r, r') V_{12}(r') \psi_{2,m}(r'), \quad (12)$$

где функция Грина выражается как

$$G_{1,m}^+(r, r') = \frac{\pi m^*}{\hbar^2} \begin{cases} \chi_m^1(r') \chi_m^2(r), & r > r', \\ \chi_m^1(r) \chi_m^2(r'), & r < r'. \end{cases} \quad (13)$$

Обратимся теперь к уравнению (9). Если в (9) пренебречь слагаемым с  $V_{21}$ , то оно приобретет вид 1D уравнения Шредингера. В зависимости от параметров притягивающей ямы  $V_{22}(r)$  в эффективном потенциале  $V_{22,m}(r)$  при некоторых значениях энергии  $\mathcal{E}_{j,m}$  могут существовать связанные состояния  $u_{j,m}$  ( $j = 1, \dots, N$ ) и состояния непрерывного спектра, которые мы обозначим  $u_{\nu,m}(r)$ . Принимая во внимание локализованные состояния и состояния сплошного спектра, запишем решение (8) в виде

$$\psi_{2,m}(r) = \sum_{\lambda} A_{\lambda,m} u_{\lambda,m}(r), \quad (14)$$

где  $A_{\lambda,m} = (A_{j,m}, A_{\nu,m})$  - пока произвольные амплитуды,  $\lambda = (j, \nu)$  - полный набор квантовых чисел;  $u_{\lambda,m} = (u_{j,m}, u_{\nu,m})$ .

Подставляя (12) и (14) в (9) и учитывая ортогональность состояний  $u_{\lambda,m}(x)$ , получим уравнение для нахождения амплитуд  $A_{\lambda,m}$ :

$$(E - \mathcal{E}_{\lambda,m}) A_{\lambda,m} - \sum_{\lambda'} U_{\lambda,\lambda';m} A_{\lambda',m} = F_{\lambda,m}, \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} U_{\lambda,\lambda';m} &= \int_0^{\infty} dr r \int_0^{\infty} dr' r' u_{\lambda,m}(r) V_{12}(r) \times \\ &\times G_{1,m}(r, r') V_{21}(r') u_{\lambda',m}(r'), \\ F_{\lambda,m} &= \int_0^{\infty} dr r u_{\lambda,m}(r) V_{12}(r) \chi_m^1(r). \end{aligned} \quad (16)$$

В свою очередь, функция  $\psi_{1,m}$  получается из (12), если в правую часть подставить  $\psi_{2,m}$ , определяемое (14):

$$\begin{aligned} \psi_{1,m}(r) &= \chi_m^1(r) + \\ &+ \sum_{\lambda} \left( \int_0^{\infty} dr' r' G_{1,m}(r, r') V_{12}(r') u_{\lambda,m}(r') \right) A_{\lambda,m}. \end{aligned} \quad (17)$$

Рассмотрим асимптотику волновой функции  $\psi_{1,m}(r)$  при  $r \rightarrow +\infty$ . Исходя из (17) с учетом (11) и (13), можно записать

$$\psi_{1,m}(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi k_1 r}} \left( \cos \left( k_1 r - \frac{\pi m}{2} - \frac{\pi}{4} + \delta_m^p \right) + \tan \delta_m^f \sin \left( k_1 r - \frac{\pi m}{2} - \frac{\pi}{4} + \delta_m^p \right) \right), \quad (18)$$

где  $\delta_m^f$  – дополнительный сдвиг фаз, определяемый выражением

$$\tan \delta_m^f = \frac{\pi m^*}{\hbar^2} \sum_{\lambda} F_{\lambda,m} A_{\lambda,m}. \quad (19)$$

Таким образом, фазы рассеяния, обусловленные интерференцией, могут быть найдены из (15) и (19). Отметим, что характеристики рассеяния зависят от полной фазы  $\delta_m = \delta_m^p + \delta_m^f$ .

Парциальное сечение определяется состояниями с заданной проекцией момента  $m$ . Если в радиальном направлении центр имеет характерный размер  $\sim R$ , то заметный вклад в потенциальный фазовый сдвиг и парциальное сечение рассеяния дают состояния с  $m \sim k_1 R$ . При этом в поле потенциала  $V_{11,m}(r)$  возможны резонансы Брейта–Вигнера, обусловленные интерференцией радиальных встречных волн. Дискретные уровни в яме  $V_{22,m}(r)$  дают дополнительные резонансы, которые определяются фазовым сдвигом  $\delta_m^f$ . Исследуем поведение фазы вблизи уединенного уровня. В этом случае

$$\tan \delta_m^f = \frac{\pi m^*}{\hbar^2} \frac{F_{1,m}^2}{E - \mathcal{E}_{1,m} - U_{1,1;m}}. \quad (20)$$

Нетрудно показать, что вблизи рассматриваемого уровня функции  $F_{1,m}$  и  $U_{1,1;m}$  медленно зависят от энергии и их можно приближенно считать постоянными. Исходя из этого, мы можем записать

$$\tan \delta_m^f = \frac{\Gamma_m^f}{E - \mathcal{E}_{R,m}}, \quad \Gamma_m^f = \frac{\pi m^*}{\hbar^2} F_{1,m}^2, \quad (21)$$

$$\mathcal{E}_{R,m} = \mathcal{E}_{1,m} - U_{1,1;m}.$$

Следовательно, парциальные сечения вблизи резонанса ведут себя как

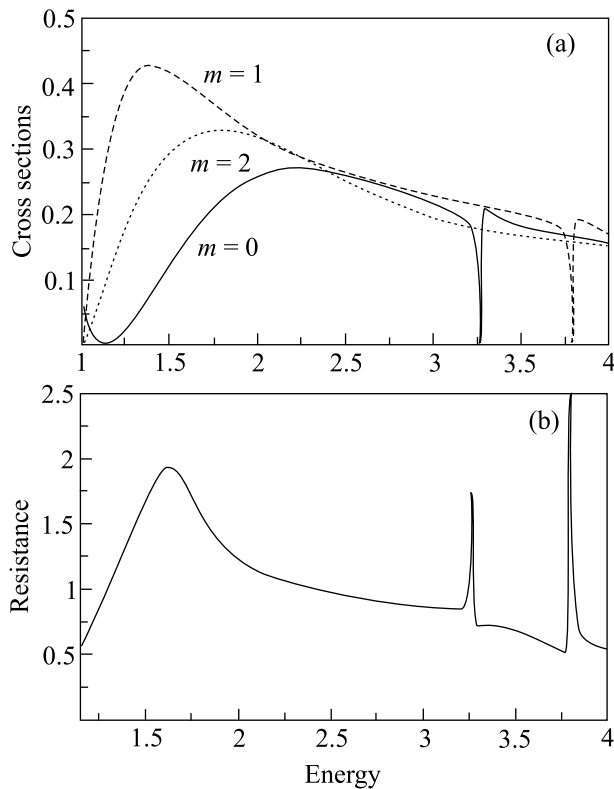
$$\sigma_m = \frac{\pi}{k_1} \sin^2(\delta_m^p) \frac{(\epsilon + q_m)^2}{\epsilon^2 + 1}, \quad (22)$$

где  $\epsilon = \Gamma_m^f / (E - \mathcal{E}_{R,m})$ ,  $q_m = \cot \delta_m^p$ . Как видно из (22), вблизи теперь уже виртуального уровня, в сечении рассеяния имеются асимметричные резонансы Фано [1]. Отметим, что как ширина, так и сдвиг затравочного положения уровня зависят от конфигурационного взаимодействия дискретного уровня с континуумом.

В качестве иллюстрации приведем результаты расчета парциальных сечений и сопротивления для случая центров, моделируемых потенциальными ямами цилиндрической формы (глубина  $V_0$ , высота  $W_a$  и радиус  $R$ ). Решения уравнений внутри и вне центра как для связанных состояний, так и для состояний рассеяния можно выразить через функции Бесселя. Таким образом, для данной задачи нетрудно найти фазы потенциального рассеяния, дискретные уровни и получить явное выражение для матричных элементов, входящих в (15). Численное решение системы линейных уравнений (15) выполняется стандартным методом. Приведем результаты вычислений в простейшем случае. Будем считать, что в квантовой яме шириной  $W$  имеются одинаковые квантовые точки на расстоянии  $Z_0 = 0.1 W$  от плоскости симметрии ямы ( $z = W/2$ ), их размер  $W_a = 0.4 W$ . Пусть глубина исходной ямы такова, что:  $V_{11} = 1.515 E_1$ ,  $V_{12} = 0.521 E_1$  и  $V_{22} = 1.0 E_1$ . В качестве единицы энергии выбрана  $E_1 = \pi^2 / 2m^* W^2$ . Если радиус центра выбрать равным  $R = W$ , то в поле центра может существовать уровень с  $m = 0$ :  $\mathcal{E}_{1,0} = 3.326 E_1$  и уровень с  $m = 1$ :  $\mathcal{E}_{1,1} = 3.777 E_1$ . Как видно из рисунка (а), каждый уровень приводит к появлению резонансов Фано в парциальных сечениях при  $\mathcal{E}_{R,0} = 3.3113 E_1$  ( $m = 0$ ) и  $\mathcal{E}_{R,1} = 3.7602 E_1$  ( $m = 1$ ); ширины резонансов равны соответственно  $0.0064 E_1$  и  $0.0059 E_1$ . Остальные парциальные сечения монотонно зависят от энергии в рассматриваемом интервале энергий. Отметим, что при энергии, близкой к дну зоны с  $n = 1$  виден резонанс Брейта-Вигнера ( $\mathcal{E}_{BW,3} = 1.51 E_1$  с  $m = 3$ ; его ширина  $0.42 E_1$ ).

Каждый резонанс Фано дает вклад в сопротивление в виде дополнительных характерных профилей (на рисунке (b) видны два резонансных пика вблизи отщепившихся уровней). Поскольку вклад в сопротивление определяется транспортным сечением рассеяния, он состоит из двух слагаемых:  $\int_0^{2\pi} d\theta |f(\theta)|^2 - \int_0^{2\pi} d\theta |f(\theta)|^2 \cos \theta$ . Каждое из слагаемых ведет себя вблизи резонанса Фано подобно тому, как это имеет место для парциальных сечений. Однако в разности сечений минимуму будет соответствовать максимум сопротивления и наоборот, то есть в остаточном сопротивлении должны наблюдаться перевернутые (по отношению к парциальным сечениям) резонансы Фано.

В случае, когда параметры центра таковы, что в нем имеется несколько уровней (резонансов), оказываются возможными новые эффекты, обусловленные



Парциальные сечения  $m = 0, 1, 2$  (a) и сопротивление системы (b) как функции энергии электрона. Резонансы Фано видны при:  $\mathcal{E}_{R,0} = 3.3113 E_1$  ( $m=0$ ) и  $\mathcal{E}_{R,1} = 3.7602 E_1$  ( $m=1$ ). В качестве единиц измерения сечения, сопротивления и энергии выбраны соответственно:  $\sigma_0 = W$ ,  $\rho_0 = 2\hbar n_i / e^2 n$  и  $E_1 = \pi^2 / 2m^* W^2$

интерференцией волн в области центра. Например, возможно пересечение резонансов Брейта–Вигнера с резонансами Фано, что ведет к “схлопыванию” (коллапсу) резонансов Фано. При этом может происходить “качание” (свинг) резонанса Фано, когда изменяется последовательность нуль–полюс на последовательность полюс–нуль. Указанные эффекты вполне аналогичны имеющим место в квазиодномерной системе [13].

Таким образом, наночетры, имеющие конечную протяженность, создают серию квазисвязанных состояний, которые проявляются как резонансно-антирезонансные пары в сечениях рассеяния и сопротивлении. Характеристики резонансов Фано определяют величину конфигурационной связи состояний в наноструктуре. Резонансный вклад в сопротивление может быть обнаружен, например, по зависимости сопротивления от положения уровня Ферми.

В заключение авторы выражают признательность А. А. Алешкину за полезные обсуждения. Данная работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант # 01-02-16569).

1. U. Fano, Phys. Rev. **104**, 1866 (1961).
2. U. Fano and J. W. Cooper, Phys. Rev. **A137**, 1364 (1965).
3. R. K. Adair, C. K. Bockelman, and R. E. Peterson, Phys. Rev. **76**, 308 (1949).
4. J. A. Simpson and U. Fano, Phys. Rev. Lett. **11**, 158 (1963).
5. F. Cardeira, T. A. Fjeldly, and M. Cardona, Phys. Rev. **B8**, 4734 (1973).
6. J. Feist, F. Capasso, C. Sirtori et al., Nature (London) **390**, 589 (1997).
7. H. Schmidt, K. L. Campman, A. C. Gossard, and A. Imamoglu, Appl. Phys. Lett. **70**, 3455 (1997).
8. C. P. Holfeld, F. Löser, M. Sudzius et al., Phys. Rev. Lett. **81**, 874 (1998).
9. J. Göres, D. Goldhaber-Gordon, S. Heemeyer et al., Phys. Rev. **B62**, 2188 (2000).
10. О. А. Ткаченко, В. А. Ткаченко, Д. Г. Бакшеев и др., Письма в ЖЭТФ **71**, 366 (2000).
11. Ч. Киттель, *Квантовая теория твердых тел*, М.: Наука, 1967.
12. H. Feshbach, Ann. Phys. **5**, 357 (1958).
13. C. S. Kim, A. M. Satanin, Y. S. Joe, and R. M. Cosby, Phys. Rev. **B60**, 10962 (1999).