

УДК 621.315

ПРИМЕСНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ С МОДИФИЦИРОВАННЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ ПЕШЛЯ–ТЕЛЛЕРА

Д.Б. АЙРАПЕТЯН^{1,2}, Э.М. КАЗАРЯН¹, О.Х. ТЕВОСЯН^{1*}

¹Российско-Армянский (Славянский) Университет, Ереван

²Государственный инженерный университет Армении, Ереван

*e-mail: hovhannes.tevosyan@gmail.com

(Поступила в редакцию 4 декабря 2013 г.)

Исследованы примесные состояния в цилиндрической квантовой точке с двумя ограничивающими потенциалами: по направлению оси цилиндра – модифицированным потенциалом Пешля–Теллера, а по радиальному направлению – параболическим потенциалом. В рамках вариационного метода исследованы примесные состояния и численным методом получены зависимости энергии частицы от геометрических параметров цилиндрической квантовой точки. Выявлена зависимость энергии связи электрона от полуширины и глубины потенциальной ямы.

1. Введение

Квантовые точки (КТ) остаются одним из наиболее интенсивно исследуемых объектов нанотехнологий [1-3]. Уникальность данных систем заключается в том, что движение частиц, находящихся в них, квантовано во всех трех направлениях. Важным свойством КТ является возможность управления их энергетическим спектром в процессе роста конкретного образца. Современные методы выращивания наноструктур позволяют получить КТ различных геометрических форм и размеров. На сегодняшний день получены сферические, пирамидальные, цилиндрические, эллипсоидальные и другие типы КТ [4-8].

Во время роста КТ на границе раздела КТ и матрицы возникает ограничивающий потенциал. Важно отметить, что вид ограничивающего потенциала КТ во многих случаях зависит от метода роста КТ. Разные модели ограничивающих потенциалов приведены в работах [9-11]. В результате диффузии сформированный ограничивающий потенциал в большинстве случаев с большой точностью аппроксимируется параболическим потенциалом. Однако в действительности параболический потенциал реализуется только для нижних энергетических уровней. Очевидно, что с ростом квантового числа ход ограничивающего потенциала расходится от параболического (рис.1). Для более реалистичной аппроксимации формируемого ограничивающего потенциала в данной работе

предложено использование модифицированного потенциала Пешля–Теллера (МППТ) [12-17].

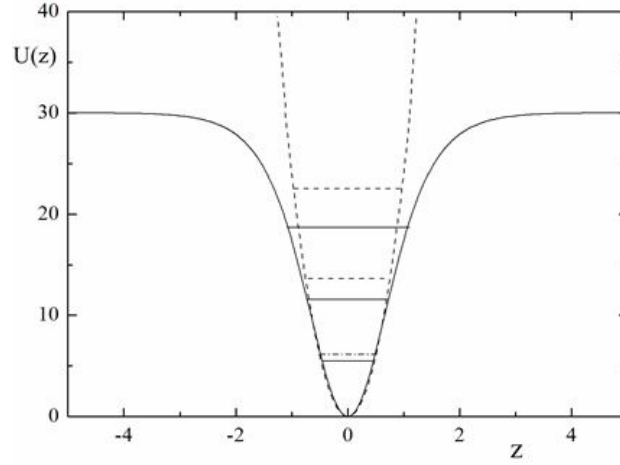


Рис.1. Модифицированный потенциал Пешля-Теллера – сплошная линия, параболический потенциал – пунктирная линия.

Отметим также, что наличие примесей в квантовых наноструктурах может коренным образом изменить энергетический спектр носителей заряда. В данной работе теоретически исследовано влияние примеси на электронные состояния в цилиндрической КТ с модифицированным потенциалом Пешля-Теллера. Численными методами получена зависимость энергии связи от параметров ограничивающих потенциалов.

2. Теория

Рассмотрим движение электрона в цилиндрической КТ при наличии кулоновского примесного центра. Отметим, что КТ ограничена по оси цилиндра (ось Z) МППТ, а в радиальном направлении – параболическим потенциалом. Потенциальную энергию электрона в цилиндрических координатах можно записать в виде

$$U(\rho, \tilde{z}) = \tilde{U}_0 - \frac{\tilde{U}_0}{\text{ch}^2\left(\frac{\tilde{z}}{\tilde{\beta}}\right)} + \frac{m_e^* \omega^2 \rho^2}{2} - \frac{e^2}{\kappa \sqrt{\rho^2 + \tilde{z}^2}}, \quad (1)$$

где $\tilde{U}_0$ и $\tilde{\beta}$ – глубина и полуширина потенциальной ямы МППТ, соответственно, m_e^* – эффективная масса электрона, ω – осцилляторная частота, e – заряд электрона, κ – диэлектрическая проницаемость. В качестве упрощения будем считать, что примесь расположена в центре КТ ($\rho = 0$, $\tilde{z} = 0$). Связь между высотой цилиндрической КТ и полушириной потенциальной ямы задается в виде $h_0 = \delta_h \tilde{\beta}$, а частота ω связана с радиусом цилиндра R_0 формулой

$\omega = \delta_\omega \frac{\hbar}{m_e^* R_0^2}$, где параметры δ_h и δ_ω определяются из эксперимента.

В случае отсутствия примесного центра задача сводится к представлению гамильтониана системы в виде суммы гамильтонианов подсистем:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2, \quad (2)$$

где

$$\hat{H}_1 = -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \gamma^2 r^2, \quad \hat{H}_2 = -\frac{\partial^2}{\partial z^2} + U_0 - \frac{U_0}{\text{ch}^2\left(\frac{z}{\beta}\right)}. \quad (3)$$

Здесь введены следующие обозначения: $r = \frac{\rho}{a_B}$, $z = \frac{\tilde{z}}{a_B}$, $U_0 = \frac{\tilde{U}_0}{E_R}$, $\beta = \frac{\tilde{\beta}}{a_B}$, $\gamma = \frac{m_e^* \omega a_B^2}{\hbar}$, $E_R = \frac{\hbar^2}{2m_e^* a_B^2}$ – эффективная энергия Ридберга, $a_B = \frac{\kappa \hbar^2}{m_e^* e^2}$ – эффективный боровский радиус электрона.

Решая уравнение Шредингера для данной системы, получаем энергетический спектр и волновую функцию носителей заряда [11]:

$$\varepsilon_0 = \varepsilon_r + \varepsilon_z = U_0 - \frac{1}{4\beta^2} \left[-(1 + 2n_z) + \sqrt{1 + 4\beta^2 U_0} \right]^2 + 2\gamma(N + 1), \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \Phi_0(r, z) = & C \left(1 - \text{th}^2 \left(\frac{z}{\beta} \right) \right)^{\varepsilon_z/2} {}_2F_1 \left\{ \varepsilon_z - s, \varepsilon_z + s + 1, \varepsilon_z + 1, \frac{1 - \text{th}(z/\beta)}{2} \right\} \times \\ & \times e^{-r^2 \gamma/2} (r^2 \gamma)^{|m|/2} {}_1F_1 \left\{ -\left(\frac{\varepsilon_r}{4\gamma} - \frac{|m| + 1}{2} \right), |m| + 1, r^2 \gamma \right\}, \end{aligned} \quad (5)$$

где m – магнитное квантовое число, C – нормировочный коэффициент, ${}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma; x)$ и ${}_1F_1(\alpha, \beta; x)$ – соответственно, обычная и вырожденная гипергеометрические функции [18].

Перейдем к нахождению энергетического спектра системы при наличии примесного центра. Гамильтониан системы в безразмерных величинах запишется в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 - \frac{2}{\sqrt{r^2 + z^2}}. \quad (6)$$

Так как уравнение Шредингера с гамильтонианом (6) не имеет точного решения, то задачу о нахождении волновой функции и энергетического спектра электрона в основном состоянии в цилиндрической КТ можно решить вариационным методом [19]. Пробную волновую функцию ищем в виде

$$\Phi(r, z) = A(\lambda) \Phi_0(r, z) e^{-\lambda \sqrt{r^2 + z^2}}, \quad (7)$$

где λ – вариационный параметр, $A(\lambda)$ – коэффициент нормировки, который можно представить в следующем виде:

$$A^{-2}(\lambda) = \int_0^{R_0} \int_{-h_0/2}^{h_0/2} \Phi_0^2(r, z) e^{-2\lambda\sqrt{r^2+z^2}} r dr dz. \quad (8)$$

Далее, следуя технике вариационного метода, для энергии частицы запишем

$$\varepsilon_{imp}(\lambda) = \int_0^{R_0} \int_{-h_0/2}^{h_0/2} \Phi^*(r, z) \hat{H} \Phi(r, z) r dr dz. \quad (9)$$

Энергия $\varepsilon(\lambda)$ определяется численным методом. Минимизируя энергию $\varepsilon(\lambda)$, окончательно находим энергию электрона ε_{imp} в цилиндрической КТ с примесным центром. Для энергии связи можем записать

$$\varepsilon_{bind} = \varepsilon_0 - \varepsilon_{imp} = U_0 - \frac{1}{4\beta^2} \left[-(1 + 2n_z) + \sqrt{1 + 4\beta^2 U_0} \right]^2 + 8\gamma(N+1) - \varepsilon_{imp}. \quad (10)$$

3. Обсуждение результатов

Перейдем к обсуждению полученных результатов. Отметим, что численные расчеты проведены для цилиндрической КТ из GaAs ($m_e^* = 0.067m_e$, $\kappa = 13.8$), при этом $E_R = 5.275$ мэВ, $a_B = 104$ Å. На рис.2 приведены зависимости энергии электрона от полуширины и глубины потенциальной ямы.

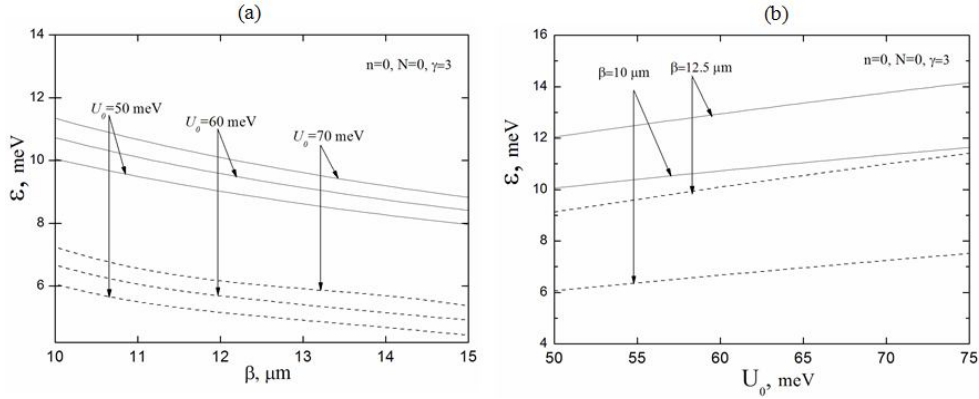


Рис.2. Зависимость энергии электрона в цилиндрической квантовой точке, от полуширины (а) и глубины (б) модифицированного потенциала Пешля–Теллера. Пунктирная линия – при наличии примесного центра, сплошная линия – примесь отсутствует.

Расположение уровней энергии электрона при наличии примеси ниже, чем при отсутствии последней, объясняется тем, что взаимодействие электрона с кулоновским центром приводит к уменьшению энергии (энергия взаимодействия отрицательная). Как видно из рис.2а, с увеличением полуширины потенциальной ямы энергия электрона в обоих случаях уменьшается, что является следствием уменьшения доли размерного квантования в энергии частицы.

На рис.3а приведена зависимость энергии связи электрона в цилиндрической КТ при наличии примеси от полуширины МППТ, при разных фиксированных значениях глубины потенциальной ямы. Как видно из рисунка, с увели-

чением β энергия связи частицы уменьшается. Отметим также, что кривые, соответствующие большим значениям глубины потенциальной ямы, расположены выше. Обратная картина наблюдается для зависимости энергии связи электрона от глубины потенциальной ямы: с уменьшением параметра U_0 энергия связи убывает. Эта зависимость приведена при различных фиксированных значениях полуширины потенциальной ямы на рис.3б.

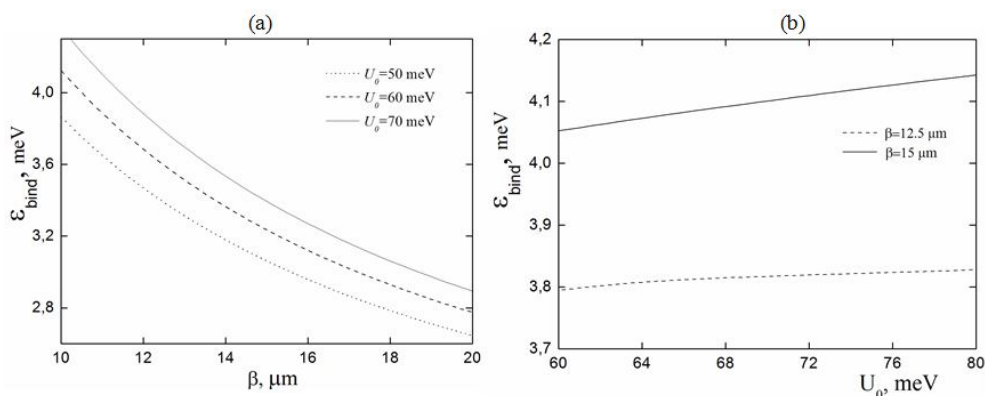


Рис.3. Зависимость энергии связи частицы в цилиндрической квантовой точке от полуширины (а) и глубины (б) потенциальной ямы.

Таким образом, область локализации электрона в цилиндрической КТ как при наличии, так и отсутствии примеси зависит от параметров U_0 и β . Энергия связи электрона зависит от геометрических параметров цилиндрической КТ, а также от глубины ограничивающего потенциала.

ЛИТЕРАТУРА

1. **P. Harrison.** Quantum Wells, Wires and Dots. Theoretical and Computational Physics. NY, John Wiley & Sons ltd, 2005.
2. **Э.М. Казарян, С.Г. Петросян.** Физические основы полупроводниковой наноэлектроники. Ереван, РАУ, 2005.
3. **R.K. Willardson** Self-Assembled InGaAs-GaAs Quantum Dots. Academic Press, v. 60, 1999.
4. **E.M. Kazaryan, L.S. Petrosyan, H.A. Sarkisyan.** Int. J. Mod. Phys. B, **15**, 4103 (2001).
5. **G. Bastard.** Phys. Rev. B, **24**, 4714 (1981).
6. **L.E. Oliveira, R. Perez-Alvarez.** Phys. Rev. B, **40**, 10460 (1989).
7. **E.M. Kazaryan, A.A. Kostanyan, H.A. Sarkisyan.** J. Phys.: Cond. Matt., **19**, 046212 (2007).
8. **P. Maksym, T. Chakraborty.** Phys. Rev. Lett., **65**, 108 (1990).
9. **F. Peeters.** Phys. Rev. B, **42**, 1486 (1990).
10. **A.K. Atayan, E.M. Kazaryan, A.V. Meliksetyan, H.A. Sarkisyan.** Journal of Contemporary Physics (Armenian Ac. Sci.), **45**, 126 (2010).
11. **Д.Б. Айрапетян, Э.М. Казарян, О.Х. Тевосян.** Вестник РАУ, **2**, 26 (2012).
12. **Н.М. Baghratyan, M.G. Barseghyan, A.A. Kirakosyan.** Journal of Physics: Conference Series, **350**, 012017 (2012).
13. **D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.Kh. Tevosyan.** Physica E, **46**, 274 (2012).

14. **Chang-Yan Chen, Yuan You, Fa-Lin Lu, Shi-Hai Dong.** Physica E, **377** 1070 (2013).
15. **H.M. Baghramyan, M.G. Barseghyan, A.A. Kirakosyan, R.L. Restrepo, M.E. Mora-Ramos, C.A. Duque.** Journal of Luminescence, **145**, 676 (2014).
16. **D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.Kh. Tevosyan.** Superlattices and Microstructures, **64**, 204 (2013).
17. **A. Sh. Achoyan, D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.Kh. Tevosyan.** Journal of Contemporary Physics (Armenian Ac. Sci.), **48**, 285 (2013).
18. Справочник по специальным функциям. Под ред. **М. Абрамовица и И. Стиган.** М., Наука, 1979.
19. **Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц.** Квантовая механика. М., Наука, 1989.

**ԽԱՌՆՈՒԿԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ ՊՅՈՇԼ–ԹԵԼԼԵՐԻ ՁԵՎԱՓՈԽՎԱԾ
ՊՈՏԵՆՑԻԱԼՈՎ ԳԼԱՆԱՅԻՆ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԿԵՏՈՒՄ**

Դ.Բ. ՀԱՅՐԱՊԵՏՅԱՆ, Է.Մ. ՂԱԶԱՐՅԱՆ, Հ.Խ. ԹԵՎՈՍՅԱՆ

Ուսումնասիրված են խառնուկային վիճակները գլանի առանցքի ուղղությամբ Պյոշլ-Թելլերի ձևափոխված պոտենցիալով, իսկ շառավղային ուղղությամբ պարաբոլային պոտենցիալով սահմանափակված գլանային քվանտային կետում: Վարիացիոն մեթոդի շրջանակներում հետազոտված են խառնուկային վիճակները, և թվային մեթոդով ստացված են էլեկտրոնի էներգիայի կախումները գլանային քվանտային կետի երկրաչափական պարամետրերից, ինչպես նաև կապի էներգիայի կախումները պոտենցիալային փոսի կիսալայնությունից և խորությունից:

**IMPURITY STATES IN A CYLINDRICAL QUANTUM DOT
WITH THE MODIFIED PÖSCHEL–TELLER POTENTIAL**

D.B. HAYRAPETYAN, E.M. KAZARYAN, H.Kh. TEVOSYAN

Impurity states in a cylindrical quantum dot with two confining potentials – modified Pöschel–Teller potential in the cylinder axis direction and parabolic potential in the radial direction, are studied. Within the framework of variation method the impurity states are studied and by using numerical methods the dependences of the particle energy on the geometrical parameters of the cylindrical quantum dot are derived. Dependences of the electron binding energy on the half-width and depth of the potential well are revealed.