Известия НАН Армении, Физика, т.49, №6, с.410-414 (2014)

УДК 621.315

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОГРАНИЧИВАЮЩЕГО ПОТЕНЦИАЛА ДЛЯ ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ

Д.Б. АЙРАПЕТЯН, Т.В. КОТАНДЖЯН, О.Х. ТЕВОСЯН*

Российско-Армянский (Славянский) университет, Ереван, Армения

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

(Поступила в редакцию 10 марта 2014 г.)

Исследованы квантовые состояния и энергетические уровни электрона в цилиндрической квантовой точке с разными моделями ограничивающего потенциала. Рассмотрены две модели ограничивающего потенциала: потенциал Морса и модифицированный потенциал Пешля–Теллера. Показано, что из-за разницы симметричного и асимметричного характера потенциалов возникает принципиальное отличие в поведениях основных уровней носителей заряда, находящихся в них. При малых значениях ширины потенциала Морса происходит квантовый выброс электрона, тогда как в случае модифицированного потенциала Пешля–Теллера этого нет.

1. Введение

При описании физических процессов в полупроводниковых квантовых точках (КТ) важную роль играет правильное математическое моделирование ограничивающего потенциала КТ. В процессе роста КТ симметрия и профиль этого потенциала формируются с одной стороны геометрией образца, а с другой – компонентным составом КТ и окружающей среды [1]. При этом влияние на форму потенциала ограничения могут оказывать также эффекты диффузии [2], деформации [3] и т.д. Если же на КТ накладывается внешнее поле, например электрическое, то в результате возникает эффективный потенциал ограничения, являющийся следствием как размерного квантования, так и квантования, обусловленного внешним полем [4-7]. В качестве ограничивающих потенциалов КТ часто используются потенциалы, имеющие прямоугольный или же параболический профили (см. например, [8-10]). Вместе с тем, бесконечный прямоугольный и параболический ограничивающие потенциалы являются хорошей аппроксимацией лишь для нижних уровней энергии в КТ. С увеличением энергии частицы она все сильнее ощущает границу перехода КТ – окружающая среда, в связи с чем возникает необходимость учета конечности высоты ограничивающего потенциала с одной стороны и непараболичность профиля ограничивающего потенциала – с другой. Указанные сложности могут быть устранены путем введения более сложных и многопараметрических потенциалов, какими являются потенциалы Вуда–Саксона, Пешля–Теллера, Морса и т.д. [11-14].

В данной работе исследованы электронные состояния в цилиндрической

КТ с модифицированным потенциалом Пешля–Теллера (МППТ), а также потенциалом Морса (ПМ) и дано сравнение энергетических спектров, а также волновых функций носителей заряда в указанных системах.

2. Электронные состояния

Рассмотрим движение электрона в цилиндрической КТ, ограничивающий потенциал которой в радиальном направлении является параболическим (ПП). В свою очередь, ограничивающий потенциал вдоль оси КТ (ось z) будем рассматривать в рамках двух моделей – ПМ и МППТ. Тогда потенциальная энергия электрона в цилиндрических координатах запишется в виде

$$\begin{aligned} U(\rho,z) &= \frac{\mu\omega^2\rho^2}{2} + U_0 + U_i(z),\ (i=1,2) \\ U_1 &= U_0\left(e^{-2z/\beta} - 2e^{-z/\beta}\right), \\ U_2 &= -\frac{U_0}{\mathrm{ch}^2(z/\beta)}, \end{aligned} \tag{1}$$

где ω – параметр ПП, а U_0 и β – соответственно, глубина и ширина потенциальных ям. Отметим, что оба потенциала вблизи точек минимума становятся параболическими.

Гамильтониан системы в цилиндрических координатах можно представить в следующем виде:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2\,, \tag{2}$$

где

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - \frac{\rho^2}{\rho_0^4}\right), \\ \hat{H}_2 &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - U_0 - U_i(z)\right), \end{aligned} \tag{3}$$

а $\rho_0 = (\hbar/\mu\omega)^{1/2}$ определяет размеры области локализации электрона.

Полную волновую функцию системы ищем в виде произведения

$$\Phi(\rho,\varphi,z) = Ce^{im\varphi}R(\rho)\chi(z)\,, \tag{4}$$

где m – магнитное квантовое число и C – нормировочный коэффициент. После подстановки волновой функции в уравнение Шредингера для радиальной части приходим к задаче двумерного осциллятора. Для волновой функции и энергии радиальной подсистемы получим следующие выражения [15]:

$$R(\rho) = e^{-\frac{\rho^2}{2\rho_0^2}}\left(\frac{\rho^2}{\rho_0^2}\right)^{|m|/2} {}_1F_1\left\{-n_\rho,\ |m|+1,\ \frac{\rho^2}{\rho_0^2}\right\}, \tag{5}$$

$$E_\rho = \hbar\omega(N+1), \tag{6}$$

где $N = 2n_\rho + |m|$ – осцилляторное квантовое число принимает значения N = 0, 1, 2, … .

Для волновых функций и энергетических уровней, описывающих электронные состояния вдоль оси КТ, можем записать [15]:

$$\chi_1(z) = e^{-\left(\beta\sqrt{U_0}e^{-z/\beta}\right)}\left(2\beta\sqrt{U_0}e^{-z/\beta}\right)^s {}_1F_1\left(-n_z, 2s+1, 2\beta\sqrt{U_0}e^{-z/\beta}\right),$$
$$\chi_2(z) = \left(1-\mathrm{th}^2\left(\frac{z}{\beta}\right)\right)^{\varepsilon_z/2} {}_2F_1\left\{-n_z, \varepsilon_z+s+1, \varepsilon_z+1, \frac{1-\mathrm{th}(z/\beta)}{2}\right\}, \qquad (7)$$

$$E_z^1 = U_0 - \left[\sqrt{U_0} - \frac{1}{\beta}\left(n_z + \frac{1}{2}\right)\right]^2,$$
$$E_z^2 = U_0 - \frac{1}{4\beta^2}\left[-(1+2n_z) + \sqrt{1+4\beta^2 U_0}\right]^2, \qquad (8)$$

где n_z – квантовое число по направлению z, которое принимает значения N = 0, 1, 2, … . Полная энергия системы будет суммой энергий аксиальной и радиальной подсистем

$$E = E_\rho + E_z. \qquad (9)$$

3. Обсуждение результатов

Для количественных оценок рассмотрим цилиндрическую КТ из GaAs с материальными параметрами: $\mu_e = 0.067m_e$, $\kappa = 13.8$, $E_R = 5.275$ мэВ, $a_B = 104$ Å. На рис.1 представлены зависимости первых двух уровней энергии электрона от ширины потенциальных ям для всех трех моделей ограничивающего потенциала. Как следует из него, во всех трех случаях с увеличением ширины ямы энер-

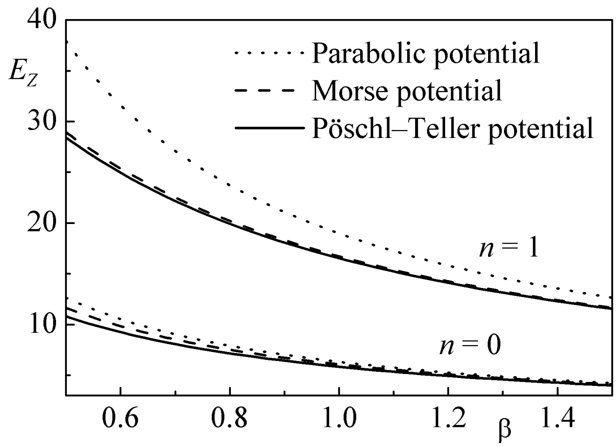

Рис.1. Зависимость энергетических уровней ПМ, МППТ и ПП от ширины ямы при фиксированном значении глубины ямы для первых двух уровней.

гетические уровни снижаются, так как уменьшается вклад размерного квантования в энергию частицы. Отметим, что энергетический уровень, соответствующий ПП, располагается выше остальных, так как этот потенциал является бесконечно высоким. С другой стороны, энергетические уровни в МППТ располагаются ниже по сравнению с аналогичными уровнями в ПМ. Последнее объясняется тем, что в случае ПМ одна из ветвей стремится к бесконечности, поэтому эффект размерного квантования здесь выражен ярче.

На рис.2а и б приведены зависимости первых четырех энергетических уровней аксиальной подсистемы от ширины ямы при фиксированном значении глубины ямы для МППТ и для ПМ. С уменьшением ширины потенциальной ямы энергетические уровни поднимаются благодаря увеличению размерного квантования. Однако, с некоторого значения β уровни начинают резко убывать. Это обусловлено квантовым выбросом электрона из этих ям, так как оба потенциала являются конечными. При этом для разных энергетических уровней минимальное значение β, начиная с которого происходит квантовый выброс, различно. Как видно из рисунков, есть принципиальная разница между поведением основных уровней обоих потенциалов – у основного уровня для малых значений ширины ПМ происходит квантовый выброс, а для МППТ этого не происходит. Это объясняется тем, что МППТ является симметричным потенциалом, и как известно из квантовой механики, для симметричных потенциалов при любых значениях ширины и глубины всегда имеется один уровень энергии.

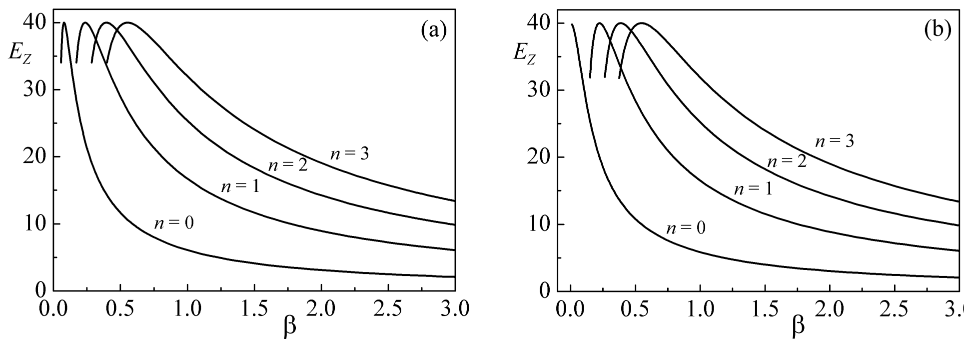

Рис.2. Зависимости первых четырех энергетических уровней аксиальной подсистемы от ширины ямы при фиксированном значении глубины ямы: (a) для ПМ и (b) для МППТ.

Наконец, на рис.3 приведены плотности вероятностей электрона для аксиальной подсистемы в зависимости от координаты *z* для ПМ и МППТ для основного и первого возбужденного уровней. Как видно из рисунка, распределение плотности вероятностей для случая МППТ имеет симметричный характер, а для случая ПМ имеет некоторый сдвиг в правую сторону.

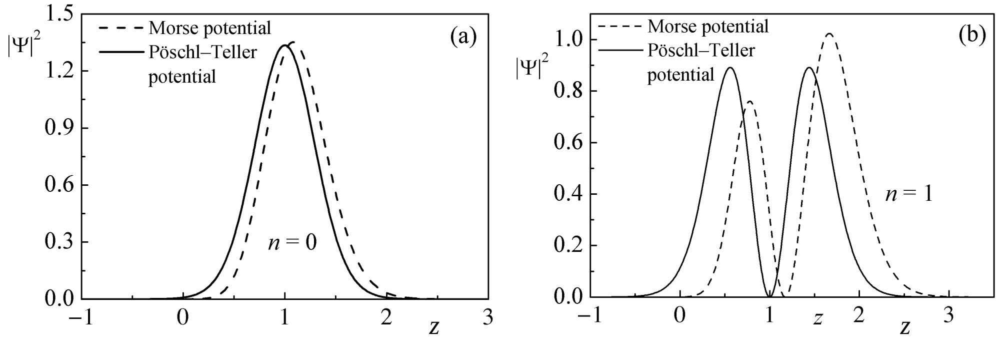

Рис.3. Плотности вероятностей электрона для аксиальной подсистемы в зависимости от координаты z для ПМ и МППТ: (a) основной уровень и (b) первый возбужденный уровень.

ЛИТЕРАТУРА

1. **N.F. Johnson.** J. Phys.: Cond. Matter, **7**, 965 (1995).
2. **P.D. Siverns, S. Malik, G. McPherson, D. Childs, C. Roberts, R. Murray, B.A. Joyce, H. Davock.** Phys. Rev. B, **58**, R10127 (1998).
3. **M. Grundman, O. Stier, D. Bimberg.** Phys. Rev. B, **52**, 11 969 (1995).
4. **S. Tarucha, D.G. Austing, T. Honda, R.J. van der Hage, L.P. Kouwenhoven.** Phys. Rev. Lett., **77**, 3613 (1996).
5. **S. Bednarek, B. Szafran, J. Adamowski.** Phys. Rev. B, **64**, 195 303 (2001).
6. **L.R.C. Fonseca, J.L. Jimenez, J.P. Leburton, R.M. Martin.** Phys. Rev. B, **57**, 4017 (1998).
7. **N.A. Bruce, P.A. Maksym.** Phys. Rev. B, **61**, 4718 (2000).
8. **B. Szafran, J. Adamowski, S. Bednarek.** Physica E, **4**, 1 (1999).
9. **Д.Б. Айрапетян, Э.М. Казарян, А.А. Саркисян.** Изв. НАН Армении, Физика, **48**, 48 (2013).
10. **M.S. Atoyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan.** Physica E, **31**, 83 (2006).
11. **T. Chakraborty, P. Pietilainen.** Phys. Rev. B, **50**, 8460 (1994).
12. **D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.K. Tevosyan.** Physica E, **46**, 274 (2012).
13. **D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.K. Tevosyan.** Superlattices and Microstructures, **64**, 204 (2013).
14. **M.G. Barseghyan, A. Hakimyfard, S.Y. Lopez, C.A. Duque, A.A. Kirakosyan.** Physica E, **43**, 529 (2010).
15. **З. Флюгге.** Задачи по квантовой механике, т.1. М., Мир, 1974.

MODELING OF CONFINEMENT POTENTIAL FOR CYLINDRICAL QUANTUM DOT

D.B. HAYRAPETYAN, T.V. KOTANJYAN, H.Kh. TEVOSYAN

Quantum states and energy levels of an electron in a cylindrical quantum dot with different models of confinement potentials are studied. Two models of confinement potentials: Morse potential and modified Pöschl–Teller potential are considered. It is shown that due to the inequality of symmetric and asymmetric nature of potentials, there is a fundamental difference between the behaviors of the ground levels of both potentials. Quantum emission of electron occurs for small values of width of the Morse potential ground level, and this does not occur for the modified Pöschl–Teller potential.