

КВАНТОВАЯ МОДЕЛЬ ТРАПЕЦИЕВИДНОГО ОГРАНИЧИВАЮЩЕГО ПОТЕНЦИАЛЬНОГО ПРОФИЛЯ В ШАРООБРАЗНОМ НАНОКРИСТАЛЛЕ

Г.С. НИКОГОСЯН^{1*}, С.Л. АРУТЮНЯН²,
В.Ф. МАНУКЯН¹, Г.Г. НИКОГОСЯН³

¹Ширакский Государственный Университет, Гюмри, Армения

²Армянский Национальный Политехнический Университет
(Гюмрийский филиал), Гюмри, Армения

³Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: hrach1960@mail.ru

(Поступила в редакцию 5 июня 2019 г.)

Рассматривается модель ограничивающего потенциала для сферической квантовой точки с тремя параметрами варьирования-глубины ямы, внешнего и внутреннего радиусов. Рассчитываются стационарные s -состояния путем точного решения и в ВКБ-приближении. Для состояний с $l \neq 0$ применяется приближенное рассмотрение, при соблюдении условий квазиклассичности. В качестве результата представлены значения энергии нижних связанных состояний при фиксированном внешнем и варьируемом внутреннем радиусах, в ямах различной глубины. Демонстрируется зависимость энергетической щели между уровнями в яме от параметров варьирования.

1. Введение

Аналитическое описание квантовых состояний и физических процессов в структурах с пониженной размерностью актуально в плане проектирования наноразмерных систем, а также имеет учебно-методический интерес как пример математического моделирования ограниченных электронных систем.

При этом для адекватной трактовки экспериментальных результатов решающее значение имеет выбор формы потенциала ограничения дискретной структуры. Наиболее часто использованные модели ограничивающего потенциала приведены в работах [1–7].

Несомненно, представляет интерес выбор такой модели ограничивающего потенциала для квазинульмерных гетероструктур, которая обладала бы по возможности большими геометрическими параметрами, подлежащими варьированию в определенных пределах, ибо в таком случае предоставляется широкая возможность для контролируемого управления расчетными уровнями энергии и

волновыми функциями носителей [8–10].

Для шарообразных КТ такой моделью является потенциал с трапецевидным профилем ограничения

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \geq b, \\ \alpha r + \beta, & a < r < b, \\ -U_0, & r \leq a, \end{cases} \quad (1)$$

который может формироваться в процессе технологического роста нульмерных образований, где подгоночные параметры α, β удовлетворяют очевидным условиям – $\alpha = U_0/(b - a) > 0$, $\beta = U_0 b/(a - b) < 0$.

2. Стационарные состояния в трапецевидной яме

Волновую функцию в сферически симметричном поле (1) можно представить в виде [11]

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = \frac{f_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (2)$$

где $f_{nl}(r)$ удовлетворяет уравнению:

$$\frac{d^2 f(r)}{dr^2} + \left[\frac{2m^*}{\hbar^2} (E - U(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] f(r) = 0, \quad (3)$$

ограниченное с одной стороны в точке $r = 0$, в силу краевого условия $f(0) = 0$. Для s – состояний ($l = m = 0$), (положим $\varepsilon = -E > 0$) получим уравнения

$$\begin{aligned} \frac{d^2 f_1(r)}{dr^2} + p^2 f_1(r) &= 0, \quad r \leq a, \\ \frac{d^2 f_2(r)}{dr^2} - q^2 f_2(r) &= 0, \quad r \geq b, \\ p &= \frac{1}{\hbar} [2m^* (U_0 - \varepsilon)]^{1/2}, \quad q = \frac{1}{\hbar} (2m^* \varepsilon)^{1/2}, \end{aligned}$$

решения которых, удовлетворяющие условию конечности в нуле и исчезающие при $r \rightarrow \infty$, имеют вид

$$f_1(r) = A \sin pr, \quad r \leq a, \quad f_2(r) = B e^{-qr}, \quad r \geq b. \quad (4)$$

В области $a < r < b$, для отрицательных значений энергии – $\varepsilon_1 = -E + \beta > 0$ получаем следующее сходящее решение

$$f(z) = C \cdot \text{Ai}(z),$$

где $\text{Ai}(z)$ – функции Эйри,

$$z = \left(r + \frac{\varepsilon_1}{\alpha} \right) \left(\frac{2m^* \alpha}{\hbar^2} \right)^{1/3}.$$

Решение уравнения (3) для s – состояний в области $a < r < b$ демонстрирует следующее поведение: оно стремится к нулю как $0.5\pi^{-1/2}z^{-1/4} \exp[-(2/3)z^{3/2}]$, при $z > 0, (r > r_n)$, и осциллирует как $\pi^{-1/2}(-z)^{-1/4} \sin[(2/3)(-z)^{3/2} + \pi/4]$, при $z < 0, (r < r_n)$, где $r_n = -\varepsilon_{1n} / \alpha$, ε_{1n} – разрешенные уровни энергии, связанные с радиусами r_n областей локализации состояний с энергиями $\varepsilon_{1n} = -E_n + \beta$.

Из условия непрерывности

$$f_1(r)_{r=a} = f(r)_{r=a}, f_1'(r)_{r=a} = f'(r)_{r=a}$$

для определения энергии E_n приходим к трансцендентному уравнению

$$pc \tan(pa) = \left[\frac{d}{dz} \ln Ai(z) \right]_{z=z_a} \cdot \left(\frac{2m^* \alpha}{\hbar^2} \right)^{1/3}, \quad z_a = \left(a + \frac{\varepsilon_{1n}}{\alpha} \right) \left(\frac{2m^* \alpha}{\hbar^2} \right)^{1/3}. \quad (5)$$

Значения $p_n = \hbar^{-1} (2m^* (U_0 + E_n))^{1/2}$, удовлетворяющие (5) при $n = 1, 2, \dots$, определяют возможные уровни энергии E_n .

3. Квазиклассическое рассмотрение

Для определения уровней энергии в трапециевидной потенциальной яме можно воспользоваться также приближенным ВКБ – методом [12]. Фаза волновой функции состояния с E_n в области $0 < r \leq a$ $\phi_1(r) = \hbar^{-1} (2m^* (U_0 + E_n))^{1/2} r$. Можно убедиться, что в поле с линейным потенциалом квазиклассическое приближение для низших состояний ($n \geq 1$) приводит к значениям энергии, не сильно отличающимся от точных значений [13]. Так что для фазы волновой функции в области $a < r < r_n$ можно использовать асимптотический вид

$$\phi_2(r) = \frac{2}{3} \left[\left(\frac{2m^* \alpha}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(-r + \frac{E_n - \beta}{\alpha} \right) \right]^{3/2} + \frac{\pi}{4}.$$

Полное изменение фазы волновой функции в стационарном состоянии с энергией E_n в области движения $0 < r < r_n$

$$\Delta\phi = \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{1/2} \left[a(U_0 + E_n)^{1/2} - \frac{2(b-a)}{3} \frac{(U_0 + E_n)^{3/2}}{U_0} \right] \approx \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi,$$

что позволяет определить уровни энергии E_n . При $E_n / U_0 \ll 1$ имеем

$$E_n \approx -U_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^*} (n+1/2)^2 \left/ \left[a - \frac{2}{3}(b-a) \right] \right.^2.$$

В частности, при $b = a$ (прямоугольная яма) $E_n \approx -U_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* a^2} (n+1/2)^2$. Этот результат очевиден, так как при $U_0 \gg E_n$ прямоугольную яму можно считать бесконечно глубокой.

Для состояний с $l \neq 0$ предстоит решение уравнения (3). Можно убедиться, что при характерных параметрах квазиуменьренных полупроводниковых гетероструктур $U_0 = 0,3 \text{ eV}, a = 10 \text{ nm}, b = 12 \text{ nm}, m^* = 0,067 m_{0e}$, для низших состояний с

$$l \geq 1, \quad \left| \frac{dU_l(r)}{dr} \right|_{r \leq a} \approx 0,2285 \cdot 10^{-2} \frac{\text{eV}}{\text{nm}}, \quad \left| \frac{dU_l(r)}{dr} \right|_{r > a} \approx 0,1477 \frac{\text{eV}}{\text{nm}}.$$

Малость градиентов эффективного потенциала по обе стороны от точки разрыва непрерывности $r = a$ профиля ямы $U(r)$, удаленной от точек поворота $r = r_1, r = r_2$, позволяет применять приближение ВКБ. Связь квазиклассических волновых функций стационарного состояния в эффективной яме с обеих сторон точки разрыва определяется из условий непрерывности волновой функции и ее производной при $r = a$ [14].

В области $r < a$ квазиклассическая волновая функция в поле с потенциалом

$$U_l^{(1)}(r) = -U_0 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m^* r^2},$$

$$\psi^{(1)}(r) = \frac{A_1}{\sqrt{p_1}} \sin \left\{ \int_{r_1}^r k_1(r') dr' + \frac{\pi}{4} \right\}, \quad k_1(r) = \hbar^{-1} \left(2m^* (E - U_l^{(1)}(r)) \right)^{1/2}, \quad p_1 = \hbar k_1(r).$$

В области $r > a$ квазиклассическая волновая функция в поле с потенциалом

$$U_l^{(2)}(r) = \alpha r + \beta + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m^* r^2}$$

$$\psi^{(2)}(r) = \frac{A_2}{\sqrt{p_2}} \sin \left\{ \int_r^{r_2} k_2(r') dr' + \frac{\pi}{4} \right\}, \quad k_2(r) = \hbar^{-1} \left(2m^* (E - U_l^{(2)}(r)) \right)^{1/2}, \quad p_2 = \hbar k_2(r).$$

Точки поворота r_1, r_2 определяются из условий

$$E = -U_0 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m^* r_1^2}, \quad E = \alpha r_2 + \beta + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m^* r_2^2}.$$

Условия непрерывности

$$\Psi^{(1)}(a) = \Psi^{(2)}(a), \quad \left(\frac{d}{dr} \Psi^{(1)}(r) \right)_{r=a} = \left(\frac{d}{dr} \Psi^{(2)}(r) \right)_{r=a}$$

приводят к соотношению

$$\cot \left\{ \int_a^r \frac{1}{\hbar} p_1(r') dr' + \frac{\pi}{4} \right\}_{r=a} \cdot \left[\frac{d}{dr} \int_a^r p_1(r') dr' \right]_{r=a} = \cot \left\{ \int_a^{r_2} \frac{1}{\hbar} p_2(r') dr' + \frac{\pi}{4} \right\}_{r=a} \cdot \left[\frac{d}{dr} \int_a^{r_2} p_2(r') dr' \right]_{r=a},$$

позволяющему определить энергию связанного состояния с $l \neq 0$.

При выполнении условий квазиклассичности $k_{1,2}(r)$ являются плавными функциями от r , так что при вычислении производных $\frac{d}{dr} \Psi$ учитывалась зависимость от r только в аргументе синуса. Интегралы, фигурирующие в трансцендентном уравнении энергии, представляются в виде

$$I_1(r) = \int_a^r p_1(r') dr' = \Lambda \left\{ (r^2 - R^2)^{1/2} - (r_1^2 - R^2)^{1/2} - R \left(\arccos \frac{R}{r} - \arccos \frac{R}{r_1} \right) \right\},$$

$$\Lambda = (2m^*(E + U_0))^{1/2}, R^2 = \frac{l(l+1)\hbar^2}{\Lambda^2}.$$

Ввиду малости градиента

$$\left| \frac{dU_l^{(2)}(r)}{dr} \right| = \left| \alpha - \frac{l(l+1)\hbar^2}{m^* r^3} \right| \ll 1,$$

имеем

$$\alpha r \sim \frac{l(l+1)\hbar^2}{m^* r^2},$$

так что

$$I_2(r) = \int_r^{r_2} p_2(r') dr' \approx \int_r^{r_2} \left(2m^* \left(E - \beta - \frac{3}{2} \alpha r' \right) \right)^{1/2} dr'$$

$$= \frac{2(2m^*)^{1/2}}{3t} \left[(\kappa - tr)^{3/2} - (\kappa - tr_2)^{3/2} \right],$$

$$\kappa = E + \frac{U_0 b}{b-a}, t = \frac{3}{2} \left(\frac{U_0}{b-a} \right).$$

4. Заключение

На рисунке приводятся зависимости энергии нижних связанных состояний с $l = 0$ в трапецевидном поле сферического нанокристалла при различных значениях глубины потенциальной ямы U_0 и величины внутреннего радиуса a , полученные путем графического решения трансцендентного уравнения (5).

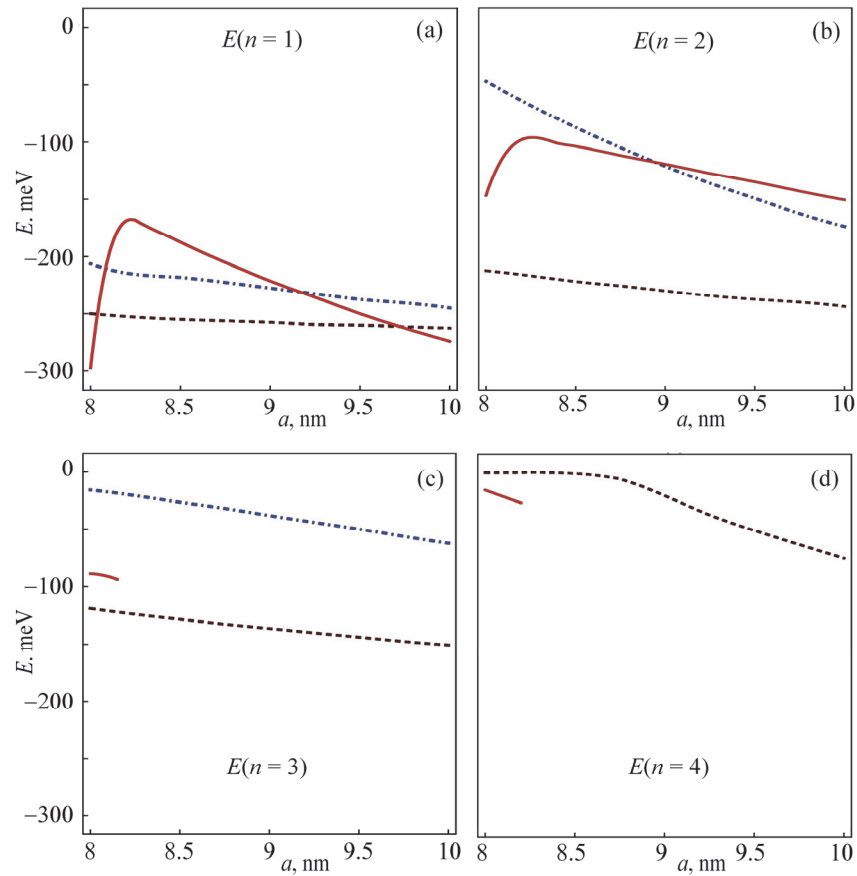


Рисунок. Энергетические уровни стационарных состояний в трапециевидной яме при различных U_0 . Штриховой пунктир – $U_0 = 0.3\text{eV}$, штрихпунктир – $U_0 = 0.4\text{eV}$, сплошная линия – $U_0 = 0.5\text{eV}$.

Очевидно различие влияний варьируемых параметров U_0 и a на энергетические уровни основного и возбужденных состояний, что может использоваться при конструировании наноразмерных структур.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по науке МОН РА в рамках научного проекта №18SH-1C005.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Р.А. Maksym, Т. Chakraborty.** Phys. Rev. Lett., **65**, 108 (1990).
2. **А.О. Говоров, А. В. Чаплик.** Письма в ЖЭТФ, **52**, 681 (1990).
3. **F.M. Peeters.** Phys. Rev. B, **42**, 1486 (1990).
4. **W. Kohn.** Phys. Rev., **123**, 1242 (1961).
5. **R.J. Boyd.** Nature (London), **310**, 480 (1984).
6. **В.Д. Кревчик, А. Б. Грунин, Р. В. Зайцев.** ФТП, **36**, 1225 (2002).
7. **B. Boyacioglu, A. Chatterjee.** J. Appl. Phys., **112**, 083514 (2012).

8. **Д. А. Багдасарян, Д. Б. Айрапетян, А. А. Саркисян, Э. М. Казарян, А. Медвид.** Изв. НАН Армении, Физика, **52**, 177 (2017).
9. **Е. Kazaryan, L. Petrosyan, V. Shahnazaryan, H. Sarkisyan.** Commun. Theoretical Physics, **63**, 255 (2015).
10. **Д. Багдасарян, Д. Айрапетян, Э. Казарян.** Изв. НАН Армении, Физика, **51**, 211 (2016).
11. **Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц.** Квантовая механика, том **3**. Москва, Наука, 1989.
12. **Э. Вихман.** Квантовая физика, БКФ, том **4**. Москва, Наука, 1986.
13. **Э.М. Казарян, С.Г. Петросян.** Физические основы полупроводниковой наноэлектроники, Ереван, РАУ, 2005.
14. **А.С. Давыдов.** Квантовая механика, Москва, ФМ, 1963.

ՄԱՀՄԱՆԱՓԱԿՈՂ ՄԵՂԱՆԱԿԵՐՊ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼԻ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ՄՈՂԵԼԸ
ԳՆԴԱՁԵՎ ՆԱՆՈԲՅՈՒՐԵՂՈՒՄ

Հ.Ս. ՆԻԿՈՂՈՍՅԱՆ, Ս.Լ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Վ.Ֆ. ՄԱՆՈՒԿՅԱՆ,
Գ.Հ. ՆԻԿՈՂՈՍՅԱՆ

Դիտարկվում է գնդաձև քվանտային կետի համար սահմանափակող պոտենցիալի մոդել երեք փոփոխվող պարամետրերով. հորի խորությունը, ներքին և արտաքին շառավիղները: Հաշվարկվում են ստացիոնար s -վիճակները ինչպես ճշգրիտ, այնպես էլ ՎԿԲ-մոտավորությամբ: $l \neq 0$ վիճակների համար կիրառվում է մոտավոր դիտարկում, քվադրատականության հայտանիշների հաշվառմամբ: Որպես արդյունք ներկայացված են ստորին կապված վիճակների էներգիայի արժեքները սևեռված արտաքին և փոփոխվող ներքին շառավիղների դեպքում, տարբեր խորությամբ քվանտային հորերի համար: Ի ցույց է դրվում հորում մակարդակների միջև էներգիական բացվածքի կախվածությունը փոփոխվող պարամետրերից:

QUANTUM MODEL OF A TRAPEZOIDAL LIMITING POTENTIAL PROFILE
IN A SPHERICAL NANOCRYSTAL

H.S. NIKOGHOSYAN, S.L. HARUTYUNYAN,
V.F. MANUKYAN, G.H. NIKOGHOSYAN

Considered limiting potential model for a spherical quantum dot with three variation parameters - well depth, external and internal radii. The stationary s -states are calculated by the exact solution and in the WKB approximation. For states with $l \neq 0$, an approximate consideration is applied, subject to the conditions of semiclassicality. As a result, the energy values of the lower bound states are presented at a fixed external and varying internal radii, in wells of various depths. The dependence of the energy gap between the levels in the well on the variation parameters is demonstrated.