

РАСЧЕТ ЭНЕРГИИ СВЯЗИ БИЭКСИТОНА В ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ КВАНОВОЙ ТОЧКЕ С ПОТЕНЦИАЛОМ МОРСА

Г.Ц. ХАРАТЯН^{1*}, Г.С. ГЕВОРКЯН¹, П.А. МАНТАШЯН^{1,2}

¹Российско–Армянский университет, Ереван, Армения

²Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: gor.kharatyan13@gmail.com

(Поступила в редакцию 8 апреля 2021 г.)

В данной статье рассмотрены биэкситонные состояния в цилиндрической квантовой точке в режиме сильного размерного квантования и показана стабильность биэкситона. Цилиндрическая квантовая точка ограничена по аксиальному направлению параболическим потенциалом, а в радиальном направлении – потенциалом Морса. Рассчитана зависимость энергии основного состояния биэкситона от геометрических параметров квантовой точки с помощью принципа неопределенностей Гейзенберга. Построена зависимость энергии связи биэкситона от частоты параболического потенциала. Оценено время жизни экситона и биэкситона в цилиндрической квантовой точке для различных параметров квантовой точки.

1. Введение

В полупроводниковой наноэлектронике одним из современных и актуальных направлений является изучение ряда задач в разных типах квантовых точках (КТ) [1–6]. КТ представляет собой часть полупроводника, у которого движение носителей заряда ограничено в пространстве по всем направлениям [7–10]. Они имеют настолько маленькие размеры (порядка нм), что квантовые эффекты становятся существенными, и энергетический спектр становится дискретным. Благодаря этому они имеют широкий спектр поглощения, узкий и симметричный пик флуоресценции, высокую яркость и фотостабильность [11–13]. Изменяя размеры, формы и барьерные материалы КТ можно управлять их свойствами, в особенности излучением, что делает актуальным их использование в оптоэлектронных приборах. Квантовые точки являются перспективными материалами для использования в таких сферах, как хранение данных высокой плотности, квантовая обработка информации, квантовые вычисления и квантовая криптография [13]. Так же в медицине, биологии, оптике, оптоэлектронике, микроэлектронике, полиграфии, энергетике.

Большой интерес представляет исследование многочастичных КТ, в частности экситонных систем (экситоны, трионы, кватернионы, т.д.) [14–16]. В КТ, из-за сильного размерного квантования и локализации, энергия и стабильность, следовательно, и время жизни этих систем увеличивается по сравнению с объемными полупроводниками, где, из-за малого значения времени жизни, такие системы иногда даже невозможна реализовать [17–19]. Одним из интересных задач является изучение четырехчастичных систем, особенно биэкситонов.

Биэкситон представляет собой нейтральную квазичастицу, состоящую из двух электронов и двух дырок. Биэкситонные системы благодаря эффекту размерного квантования имеют большую энергию связи и стабильность. В них возникают такие эффекты, как двухфотонное поглощение, изменение нелинейной восприимчивости, смещение пиков излучения фотолюминесценции [19–23]. Поэтому изучение биэкситонных систем в разных типах квантовых точек является актуальной задачей.

В данной статье рассмотрены биэкситонные состояния в сильно сплюснутой цилиндрической квантовой точке с ограничивающим потенциалом Морса.

2. Теория

Как уже отметили, мы рассматриваем цилиндрическую КТ с ограничивающим потенциалом Морса по аксиальному направлению и параболическим потенциалом в радиальном направлении. Все длины и энергии в статье измеряются боровским эффективным радиусом электрона $a_e = \hbar^2 \epsilon / m_e^* e^2$, а энергии – Ридберговской эффективной энергией $E_R = \hbar^2 / 2m_e^* a_e^2$. Здесь m_e^* – эффективная масса электрона, а ϵ – диэлектрическая проницаемость среды. Гамильтониан биэкситонной системы, который состоит из двух электронов и двух дырок, в цилиндрических координатах будет иметь следующий вид:

$$\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = \sum_j \left(\frac{1}{2m_j^*} \hat{P}_j^2 + U(\mathbf{p}_j, z_j) \right) + V_{\text{conf}} + V_{\text{int}}, \quad (1)$$

где $j = \{1, 2, a, b\}$, $q_{1,2} = -|e|$, $q_{a,b} = |e|$, \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 – координаты электронов, \mathbf{r}_a и \mathbf{r}_b – координаты дырок. Здесь \hat{P}_j – оператор импульса частицы, $U_{\text{conf}}(\mathbf{p}_j, z_j)$ – потенциальная энергия частицы в КТ, V_{int} – энергия межчастичного взаимодействия:

$$U_{\text{conf}}(\mathbf{p}_j, z_j) = \frac{1}{2} m_j \omega^2 \mathbf{p}_j^2 + \left(U_0 + U_0 \left(e^{-2z_j/\beta} - 2e^{-z_j/\beta} \right) \right), \quad (2)$$

$$V_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = \sum_{i,j} \frac{q_i q_j}{\epsilon |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (3)$$

В данной работе мы будем рассматривать случай сильно сплюснутого цилиндра, когда высота цилиндра намного меньше, чем радиус основания. Это значит, что энергию межчастичного взаимодействия можно считать двумерной.

Поэтому, полный гамильтониан системы представим в виде сумм двух гамильтонианов аксиальной и радиальной подсистем \hat{H}_ρ и \hat{H}_z , которые имеют данный вид:

$$H_\rho(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_a, \mathbf{p}_b) = \sum_j \frac{1}{2m_j^*} (\hat{P}_{pj})^2 + \sum_j \left(\frac{1}{2} m_j \omega_j^2 \rho_j^2 \right) + V_{\text{int}}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_a, \mathbf{p}_b) \quad (4)$$

$$H_z(z_1, z_2, z_a, z_b) = \sum_j \frac{1}{2m_j^*} (\hat{P}_{zj})^2 + \sum_j (U_0 + U_0(e^{-2z/\beta} - 2e^{-z/\beta})). \quad (5)$$

Оценим энергию основного состояния биэкситона в КТ, используя принцип неопределенности Гейзенберга. Очевидно, что при сплюснутой геометрии КТ, расположение заряженных частиц имеет вид, представленный на Рис.1.

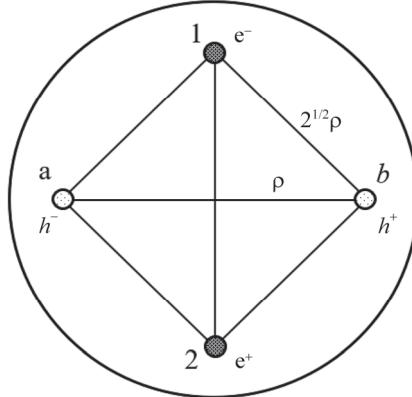


Рис.1. Расположение электронов и дырок в цилиндрической КТ.
Вид сверху.

Из-за кулоновского попарного взаимодействия однотипные частицы будут находиться друг перед другом на вершинах квадрата. Другие конфигурационные системы будут иметь больше энергии и их реализация невозможна. В общем случае электроны и дырки находятся на вершинах ромба. Однако после соответствующих расчетов, а именно после минимизации энергии системы биэкситона по диагоналям ромба, видно, что соотношение диагоналей ромба зависит от соотношения эффективных масс электронов и дырок. А для использованного материала GaAs это соотношение равно 0.9, поэтому можем рассматривать квадрат [22]. В этом случае для двух электронов и двух протонов будем иметь

$$\begin{cases} \rho_1 = \rho_2 = \rho_a = \rho_b \equiv \rho, \\ p_1 = p_2 = p_a = p_b \equiv p. \end{cases} \quad (6)$$

Следовательно, для расстояний между частицами получим

$$\begin{cases} |\rho_1 - \rho_a| = |\rho_2 - \rho_a| = |\rho_1 - \rho_b| = |\rho_2 - \rho_b| = \sqrt{2}\rho, \\ |\rho_1 - \rho_2| = |\rho_a - \rho_b| = 2\rho. \end{cases} \quad (7)$$

Используя выражения для расстояний между частицами в уравнении (7), потенциал межчастичного взаимодействия можем трансформировать к следующему виду

$$V_{\text{int}} = \frac{e^2}{\epsilon \rho} (1 - 2\sqrt{2}). \quad (8)$$

Для оценки основного состояния биэкситонной системы применим принцип неопределенности Гейзенберга для каждой подсистемы по отдельности. Учитывая (8) для упрощенного вида аксиальной и радиальной энергии в безразмерных величинах, получим следующие выражения

$$E_\rho = \frac{2}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} (1 - 2\sqrt{2}) + \sigma \gamma^2 \rho^2, \quad (9)$$

$$E_z = \frac{2}{z^2} + 8U_0 (1 + e^{-2z/\beta} - 2e^{-z/\beta}), \quad (10)$$

где $\sigma = \frac{(m_e + m_h)^2}{m_e m_h}$, $\gamma = \sqrt{\frac{2}{E_R}} \omega$. Условие минимизация двух энергии подсистем

имеет вид

$$\begin{cases} \frac{dE_\rho(\rho)}{d\rho} = 0, \\ \frac{dE_z(z)}{dz} = 0. \end{cases} \quad (11)$$

После некоторых преобразований для определения минимального радиуса и z получаем уравнения:

$$\begin{cases} 2\sigma \gamma^2 \rho^4 - \rho (1 - 2\sqrt{2}) - 2 = 0, \\ -\frac{1}{z^3} + 4U_0 (-e^{-2z/\beta} + e^{-z/\beta}) = 0. \end{cases} \quad (12)$$

Решая уравнение (11) численно, можно найти зависимость минимального радиуса и z от геометрических параметров КТ. И, соответственно, подставляя полученные значения в уравнения (8) и (9), можно численно вычислить минимальную энергию биэкситона для основного состояния.

3. Обсуждение результатов

Перейдем к обсуждению результатов. В качестве материала использован GaAs, который имеет следующие материальные параметры $m_e^* = 0.067m_0$, $m_h^* = 0.45m_0$, $\epsilon = 12.9$, где m_0 – масса электрона.

На Рис.2 приведена зависимость минимального значения координаты ρ_{\min} от частоты параболического потенциала γ . Как видно из рисунка с

увеличением параметра γ минимальный радиус уменьшается. Используя выше-приведенную зависимость, можно в соответствии с формулой (7) рассчитать зависимость энергии основного состояния радиальной подсистемы от частоты параболического потенциала γ (см. Рис.2). Эта зависимость имеет линейный характер и с увеличением частоты параболического потенциала радиальная энергия увеличивается, что является следствием увеличения размерного квантования.

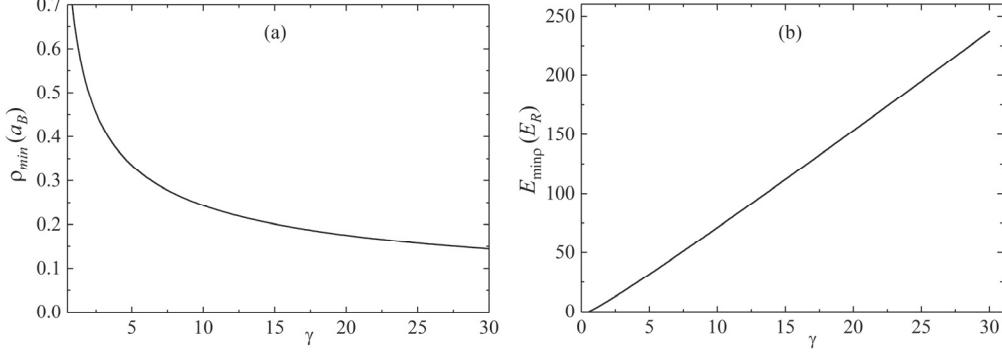


Рис.2. Зависимость минимального значения ρ_{min} (а), а также радиальной энергии основного состояния биэкситона (б) от частоты параболического потенциала γ .

Аналогично вышесказанному, был проведен расчет для аксиальной подсистемы. Первым шагом была рассчитана зависимость минимального значения z_{min} от ширины потенциальной ямы. Результаты расчетов приведены на Рис.3а, где приведена зависимость z_{min} от ширины потенциальной ямы при трех фиксированных значениях глубины потенциальной ямы.

Как видно из рисунка, с увеличением ширины потенциальной ямы увеличивается и значение z_{min} . Обратная зависимость наблюдается у минимального значения аксиальной энергии основного биэкситонного состояния (см. Рис.3б). С увеличением ширины потенциальной ямы энергия уменьшается. При этом

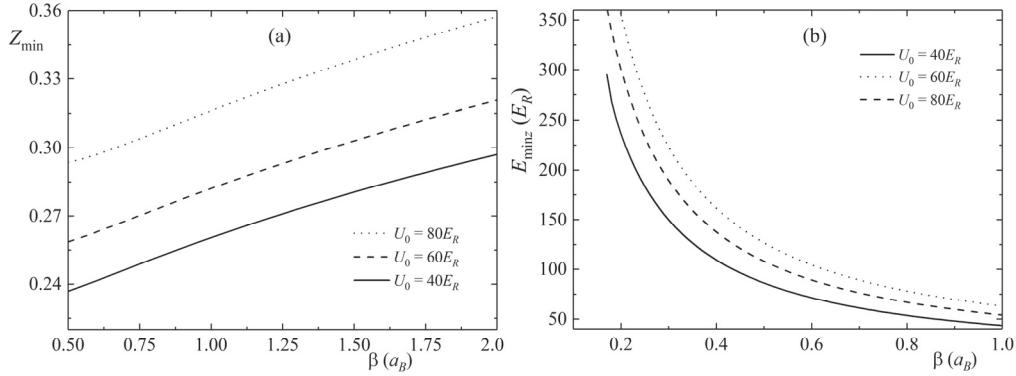


Рис.3. Зависимость минимального значения z_{min} (а), а также аксиальной энергии основного состояния биэкситона (б) от ширины потенциальной ямы при фиксированных значениях глубины потенциальной ямы.

уровни, соответствующие большим значениям глубины ямы, расположены выше, чем уровни, соответствующие малым значениям глубины ямы.

На Рис.4 показана зависимость минимальной аксиальной энергии биэкситона от глубины потенциальной ямы при трех фиксированных значениях ширины потенциальной ямы. С увеличением глубины потенциальной ямы аксиальная энергия системы увеличивается.

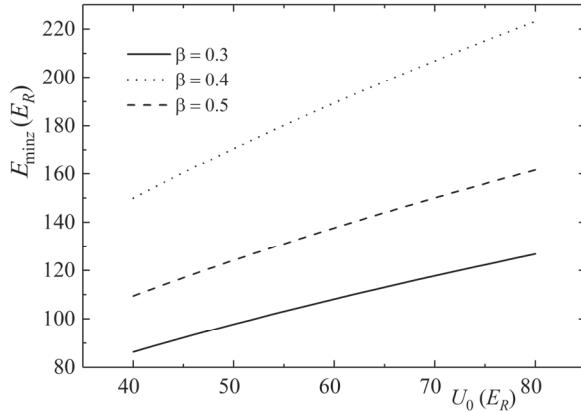


Рис.4. Зависимость минимальной аксиальной энергии системы от глубины потенциальной ямы при фиксированных значениях ширины потенциальной ямы.

Наконец, на Рис.5 приведена зависимость энергии связи биэкситона от параметра γ параболического потенциала. Энергия связи биэкситона $E_{bind} (XX)$ определяется как разница энергий двух экситонов $E(X)$ и энергии биэкситона $E(XX)$:

$$E_{\text{bind}} (XX) = 2E(X) - E(XX). \quad (13)$$

Как видно из рисунка, энергия связи увеличивается с увеличением частоты γ , при этом энергия связи биэкситона положительна. Следовательно, биэкситон в исследуемой цилиндрической КТ является стабильной квазичастицей. В массивных полупроводниковых структурах стабильность биэкситона является

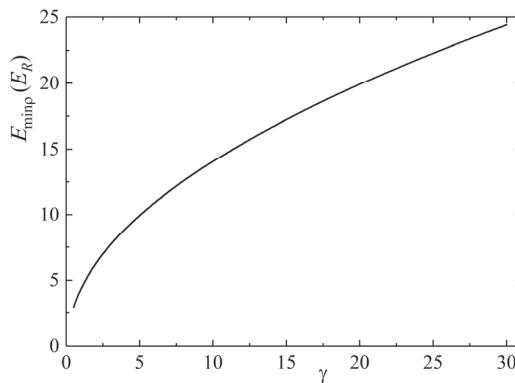


Рис.5. Зависимость энергии связи биэкситона в радиальном направлении от частоты параболического потенциала.

проблемой и эти системы неустойчивы. В таких трехмерных системах отсутствуют альтернативные факторы, которые компенсируют разрушающее действие отталкивающего кулоновского взаимодействия внутри биэкситона. А вот в КТ, ограничивающий потенциал играет роль стабилизирующего фактора, который «склеивает» частицы между собой. И соответственно, с увеличением этого фактора, то есть с увеличением влияния ограничивающего потенциала, стабильность биэкситона возрастает. Так как по аксиальному направлению мы пренебрегли кулоновским взаимодействием из-за сильного размерного квантования, энергия связи актуальна только для радиального направления.

Как последний шаг, было бы логично оценить время жизни биэкситона. Для оценки используем формулу связывающую время жизни биэкситона с временем жизни экситона [24]:

$$\tau(XX) \approx 0.25\tau(X). \quad (14)$$

Таким образом, для оценки излучательной времени жизни биэкситона можно оценить время жизни экситона. Для оценки времени жизни экситона воспользуемся формулой, полученной в [25]:

$$\tau(X) = \frac{2\pi\epsilon_0 mc^3 \hbar^2}{\sqrt{\epsilon} e^2 E(X)^2 f}, \quad (15)$$

где ϵ_0 электрическая постоянная, m – масса электрона, ϵ – диэлектрическая проницаемость материала, и f – сила осциллятора, определяемая по формуле:

Табл. Время жизни экситона и биэкситона в цилиндрической КТ

Полуширина	Глубина U_0 и частота γ	Время жизни, ps	
		Экситон	Биэкситон
$\beta = 0.3a_B$	$U_0 = 40, \gamma = 5$	509.96	127.49
	$U_0 = 40, \gamma = 10$	399.13	99.78
	$U_0 = 80, \gamma = 5$	372.97	93.24
	$U_0 = 80, \gamma = 10$	310.01	77.50
$\beta = 0.4a_B$	$U_0 = 40, \gamma = 5$	639.53	159.88
	$U_0 = 40, \gamma = 10$	474.34	118.58
	$U_0 = 80, \gamma = 5$	481.59	120.39
	$U_0 = 80, \gamma = 10$	381.53	95.38
$a = 0.5a_B$	$U_0 = 40, \gamma = 5$	748.47	187.12
	$U_0 = 40, \gamma = 10$	531.75	132.93
	$U_0 = 80, \gamma = 5$	576.79	144.19
	$U_0 = 80, \gamma = 10$	438.93	109.73

$$f = \frac{E_p}{E(X)} \left| \int_V \Psi_{exc}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) d\mathbf{r} \right|^2, \quad (16)$$

где E_p – энергия Кейна и для GaAs равна $E_p = 22.71 \text{ eV}$. Отметим, что эффекты взаимодействия экситона с фононами не учитываются в формуле (16) для времени жизни экситона.

В Таблице приведены значения времени жизни экситона и биэкситона для различных значений параметров цилиндрической КТ. Как следует из результатов, время жизни обоих экситонных комплексов увеличивается с увеличением полуоси β , поскольку увеличивается область локализации и уменьшается вероятность рекомбинации. Обратная картина наблюдается при увеличении глубины потенциала Морса и частоты параболического потенциала. При увеличении обоих параметров время жизни экситонных комплексов уменьшается. Таким образом, излучательное время жизни биэкситона в сильно сплюснутой цилиндрической КТ из GaAs лежит в интервале $75 \div 160$ пс.

4. Заключение

В заключение отметим, что в данной работе, рассчитана энергия основного состояния биэкситона в цилиндрической квантовой точке с ограничивающим потенциалом Морса при помощи принципа неопределенностей Гейзенberга. Рассчитана энергия основного состояния биэкситона для аксиальной и радиальной подсистем, и построены зависимости от параметров цилиндрической КТ. Показана, что энергия связи биэкситона увеличивается с увеличением частоты параболического потенциала, и следовательно, биэкситон в цилиндрической КТ является стабильной квазичастицей. Оценена излучательное время жизни биэкситона в сильно сплюснутой цилиндрической КТ из GaAs, который лежит в интервале $75 \div 160$ пс.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Государственного комитета по науке МОН РА в рамках базового научного проекта №10-2/I-5.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. Harrison. Quantum Wells, Wires and Dots. Wiley, 2005.
2. A.L. Rogach. Semiconductor Nanocrystal Quantum Dots., Heidelberg, Springer, 2008.
3. D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan. J. Contemp. Phys., **48**, 32 (2013).
4. D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan. Optics Communications, **371**, 138 (2016).
5. D.B. Hayrapetyan, G.L. Ohanyan, D.A. Bagdasaryan, H.A. Sarkisyan, S. Baskoutas, E.M. Kazaryan. Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, **95**, 27 (2018).
6. D.A. Bagdasaryan, D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan. Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, **101**, 1 (2018).
7. L. Jacak, P. Hawrylak, A. Wojs. Quantum dots, 2013.

8. **S.M. Reimann, M. Manninen.** Electronic structure of quantum dots, 2002.
9. **L. Kouwenhoven, C. Marcus.** Phys. World, **11**, 35 (1998).
10. **U. Woggon.** Springer Tracts Mod. Phys. **136**, 103 (1997).
11. **T. Chakraborty.** Quantum Dots: A survey of the properties of artificial atoms. The Netherlands, Amsterdam: Elsevier, 1999.
12. **A.D. Yoffe.** Advances in Physics, **50**, 1 (2001).
13. **D. Lalitha, A.J. Peter, C.W. Lee.** International Journal of Modern Physics B, **28**, 27 (2014).
14. **D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, T.V. Kotanjyan, H.K. Tevosyan.** Superlattices and Microstructures, **78**, 40 (2015).
15. **S.I. Pokutnyi, Y.N. Kulchin, V.P. Dzyuba, D.B. Hayrapetyan.** Crystals, **8**, 148 (2018).
16. **Y.Y. Bleyan, D.B. Hayrapetyan.** J. Contemp. Phys., **54**, 153 (2019).
17. **B. Patton, W. Langbein, U. Woggon.** Phys. Rev. B, **68**, 125316 (2003).
18. **R.A. Suris.** Optical Properties of 2D Systems with Interacting Electrons, NATO Science ebook Series. Dordrecht: Springer, 2003.
19. **C. Zhang, H. Wang, W. Chan, C. Manolatou, F. Rana.** Phys. Rev. B, **89**, 205436 (2014).
20. **T. Takagahara.** Physical Review B, **39**, 10206 (1989).
21. **S. Baskoutas, A.F. Terzis.** Journal of Computational and Theoretical Nanoscience, **5**, 88 (2008).
22. **S. Baskoutas, A.F. Terzis.** Journal of applied physics, **98**, 044309 (2005).
23. **D.B. Hayrapetyan, Y.Y. Bleyan, D.A. Baghdasaryan, H.A. Sarkisyan, S. Baskoutas, E.M. Kazaryan.** Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, **105**, 47 (2019).
24. **G.A. Narvaez, G. Bester, A. Zunger,** Phys. Rev. B, **72**, 041307 (2005).
25. **V.A. Fonoberov, A.A. Balandin,** Appl. Phys. Lett., **85**, 5971 (2004).

CALCULATION OF THE BINDING ENERGY OF A BIEXCITON IN A CYLINDRICAL QUANTUM DOT WITH A MORSE POTENTIAL

G.Ts. KHARATYAN, G.S. GEVORGYAN, P.A. MANTASHYAN

In the current article the biexciton states in a cylindrical quantum dot in the strong size quantization regime have been discussed and the stability of the biexciton has been shown. A cylindrical quantum dot is confined in the axial direction by the parabolic potential, and in the radial direction by the Morse potential. The dependences of the ground state energy state of the biexciton on the geometric parameters of the quantum dot are calculated using the Heisenberg uncertainty principle. The dependence of the biexciton binding energy on the frequency of the parabolic potential is plotted. The lifetime of an exciton and biexciton in a cylindrical quantum dot is estimated for various parameters of the quantum dot.