

ПРИМЕСНЫЕ СОСТОЯНИЯ В КВАЗИКОНИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ

Х.С. ХАЧАТРЯН*, М.А. МКРТЧЯН

Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван, Армения

*e-mail: khachik.khachatryan@rau.am

(Поступила в редакцию 18 сентября 2024 г.)

Теоретически исследованы донорные примесные состояния в квазиконической квантовой точке. Потенциал ограничения рассматривается в рамках модели с бесконечными стенками. Задача рассмотрена при условии нахождения примеси в вершине квазиконической квантовой точки. Потенциал взаимодействия между примесью и электроном рассмотрен кулоновским, на основе атома водорода. Ввиду сложности, задача решена на основе приближенного метода конечных элементов (FEM). Методом FEM рассчитаны энергетические состояния и волновые функции системы как в присутствии, так и в отсутствие донорной примеси. На основе полученных результатов изучены плотность вероятности распределения электронного облака в квантовой точке и зависимости энергии связи примеси от геометрических параметров квазиконической квантовой точки.

1. Введение

Развитие современных технологий производства полупроводниковых наноструктур сделало возможным получение структур, в которых свободное движение носителей заряда можно ограничить в одном (квантовые пленки), двух (квантовые проволоки) или трех (квантовые точки (КТ)) направлениях [1–2]. Если на начальном этапе интерес представляли КТ с относительно простой геометрией (сферическая или цилиндрическая), то в последнее время развитие современных методов их роста привело к возможности получения КТ с нетривиальной геометрией (конической, пирамидальной, линзообразной) [3–6]. Исследованию различных физических характеристик КТ с нетривиальной геометрией посвящено большое число работ [7–12].

С точки зрения возможного применения КТ в оптоэлектронных приборах нового поколения представляет интерес теоретическое исследование оптических либо примесных состояний в КТ, поскольку может дать дополнительную информацию о некоторых физических свойствах, изучаемых наноструктур [13–17]. Так, к примеру, энергией связи, силой осциллятора и сечением фотоионизации можно манипулировать с помощью геометрических параметров КТ. В частности, в работе [16] авторы исследовали энергию связи донорной примеси в сильно-сплюснутой эллипсоидной КТ. Исследована энергия связи водородоподобной донорной примеси в сильно-сплюснутой эллипсоидальной КТ в рамках приближения эффективной массы. Рассчитаны энергии связи в зависимости от положения примеси. В работе [17] изучены энергия связи и диамагнитная восприимчи-

вость донорной примеси в цилиндрических и сферических КТ. Ясно, что примесные состояния могут вносить весомый вклад и в оптические свойства КТ [18–20]. Так в [21] исследовалась энергия связи электрона с примесью и сечение фотоионизации водородоподобной примеси в сферической многослойной квантовой точке во внешнем электрическом поле. Показано, что энергия связи и сечение фотоионизации сильно зависят от расположения примеси, напряженности и направления электрического поля.

В последнее десятилетие возрос интерес к исследованию физических характеристик конических КТ. Эти системы особенно интересны с точки зрения конструирования светодиодов нового поколения, так как являются эффективными излучателями, показывающими широкий частотный диапазон. Ранее изучались оптические характеристики конических и квазиконических КТ с учетом влияния как одночастичных, так и экситонных эффектов на спектр оптического поглощения [21–22]. Вместе с этим в КТ часто содержатся примесные центры, которые также могут оказать существенное влияние на характер оптического поглощения в КТ. В связи с этим возникает необходимость всестороннего изучения примесных состояний в таких системах.

В данной работе исследуются водородоподобные донорные примесные состояния в конической КТ с выпуклым дном. Рассчитаны зависимости энергии связи и силы осциллятора от геометрических параметров КТ и примеси. Получены зависимости сечения фотоионизации от энергии фотонов падающего света, примеси и геометрических параметров КТ.

2. Теория

Рассмотрим квазиконическую КТ из InAs (рис.1) с донорной примесью, локализованной на острие квазиконуса, со следующим ограничивающим потенциалом в радиальном и угловом направлениях:

$$V_{\text{conf}}^{\text{rad}}(r) = \begin{cases} 0, & r < r_0 \\ \infty, & r \geq r_0 \end{cases}, \quad V_{\text{conf}}^{\text{pol}}(\theta) = \begin{cases} 0, & \theta < \theta_0 \\ \infty, & \theta \geq \theta_0 \end{cases}. \quad (1)$$

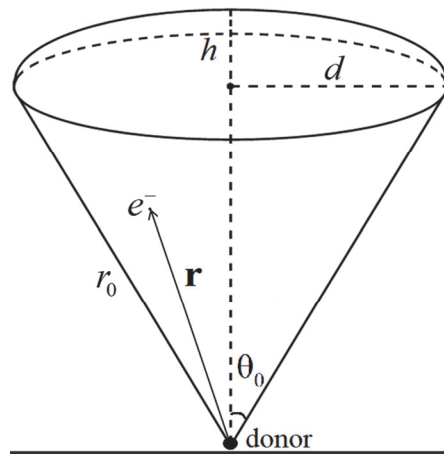


Рис.1. Геометрия квазиконической КТ.

Здесь $d = \sqrt{h(2r_0 - h)}$ – радиус основания квазиконуса, θ_0 – половина угла раствора квазиконуса, r_0 – боковая грань квазиконуса, $\mathbf{r}_1$ – радиус-вектор электрона, $h = r_0 - \sqrt{r_0^2 - d^2}$ – высота сферического сектора.

Гамильтониан исследуемой задачи имеет следующий вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V_{e-i}, \quad (2)$$

где

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V_{\text{conf}}(\mathbf{r}). \quad (3)$$

гамильтониан электрона, μ – эффективная масса электрона, $V_{\text{conf}}(\mathbf{r}) = V_{\text{conf}}^{\text{rad}}(\mathbf{r}) + V_{\text{conf}}^{\text{pol}}(\theta)$ – потенциал ограничения КТ, $V_{e-i} = Ze^2/(\epsilon r)$ – кулоновский потенциал взаимодействия электрона с примесью.

Волновая функция и энергия системы могут быть рассчитаны с помощью метода конечных элементов (FEM) [23]. Метод конечных элементов широко используется в квантовой физике для расчета энергетических уровней КТ с нетривиальной геометрией. Основная идея заключается в разбиении исследуемой КТ на конечные элементы (элементы сетки), как внутри КТ так и в окружающей среде, таким образом реализация граничных условий при конечной глубине потенциальной ямы осуществляется автоматически, путем приравнивания соответствующих решений на стыковых отрезках сеток.

На рис.2 показаны пространственные распределения электрона в квазиконической КТ при $\theta_0 = 60^\circ$ и постоянной боковой грани $r_0 = 1a_B$, для различных состояний.

Идентичное пространственное распределение электрона в квазиконической КТ изображено на рис.3, при $\theta_0 = 20^\circ$ и постоянной боковой грани $r_0 = 1a_B$.

3. Результаты и их обсуждение

Прежде чем перейти к обсуждению результатов напомним, что в качестве материала КТ был выбран InAs. Вот некоторые характерные параметры данного

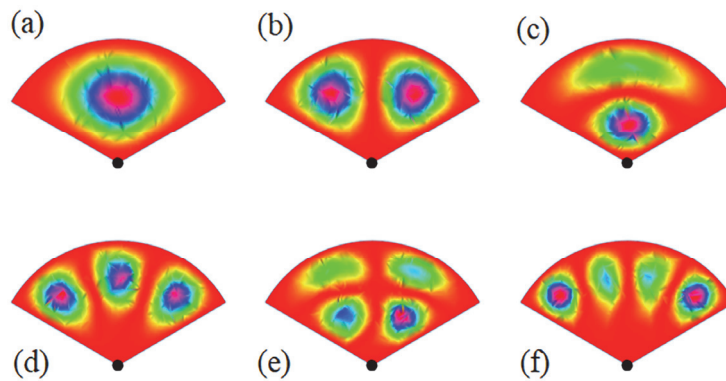


Рис.2. Плотность вероятности распределения электронного облака с примесью в вершине квазиконической КТ: (a) – основное состояние, (b–f) – возбужденные состояния с 2-го по 6-ое, соответственно, при $\theta_0 = 60^\circ$.

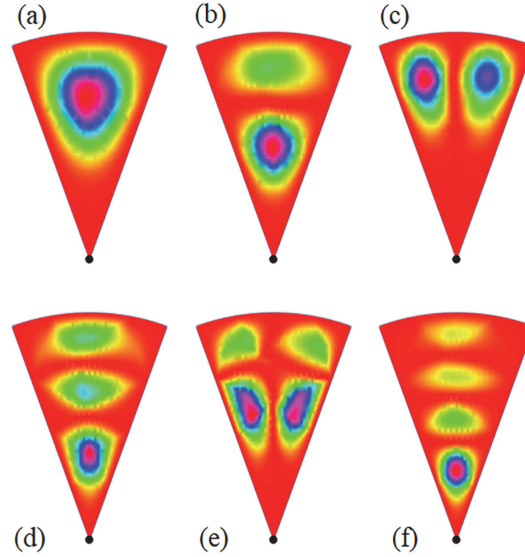


Рис.3. Плотность вероятности распределения электронного облака с примесью в вершине квазиконической КТ: (a) – основное состояние, (b–f) – возбужденные состояния с 2-го по 6-ое, соответственно, при $\theta_0 = 20^\circ$.

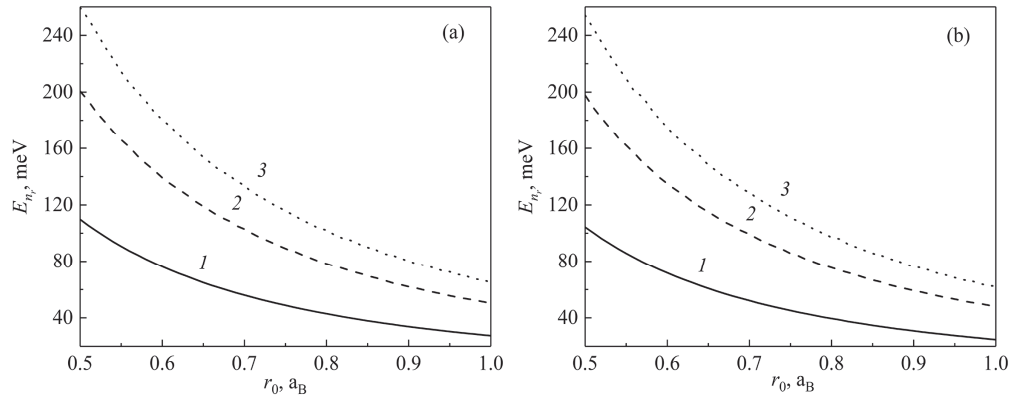


Рис.4. Зависимость полной энергии системы без примеси (a) и с примесью (b) от боковой грани r_0 для состояний $n_r = 1$ (кривая 1), $n_r = 2$ (кривая 2), $n_r = 4$ (кривая 3) при $\theta_0 = 50^\circ$.

полупроводника: эффективная масса – $\mu_e = 0.023m_0$, где m_0 – масса свободного электрона, диэлектрическая постоянная – $\epsilon = 15.5$, боровский радиус – $a_B = 35.62$ нм.

Как видно из рис.4, при увеличении боковой грани r_0 (соответственно и радиуса основания квазиконуса d и высоты изогнутой части квазиконуса h) и постоянном угле $\theta_0 = 60^\circ$ энергия системы монотонно уменьшается. Происходит это потому, что положительная энергия размерного квантования становится меньше, вследствие чего полная энергия системы уменьшается.

На рис.5 изображена зависимость энергии связи системы от боковой грани r_0 (a) и от половины угла раствора θ_0 (b). Условимся, что в качестве энергии

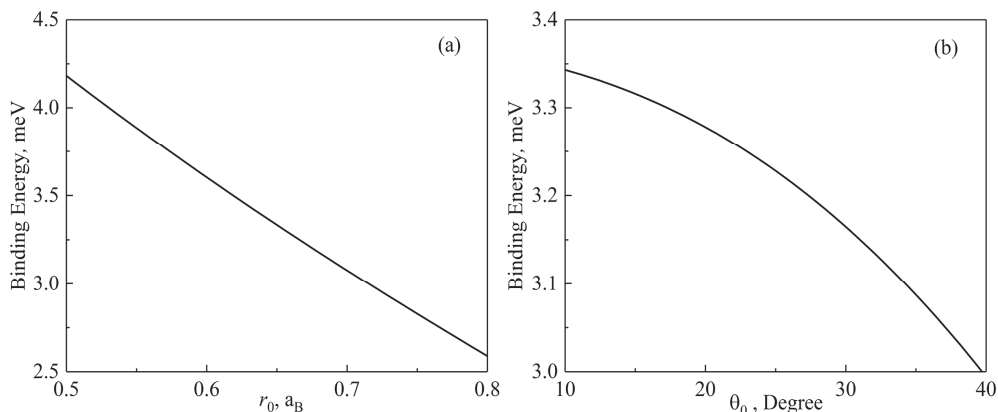


Рис.5. Зависимость энергии связи системы от (а) боковой грани r_0 при $\theta_0 = 60^\circ$ и от (б) половины угла раствора θ_0 , при $r_0 = a_B$.

связи мы понимаем разницу энергий системы без примеси и с примесью: $E_{\text{Binding}_n} = E_n - E_{\text{impurity}_n}$. Рост r_0 и θ_0 приводит к спаду энергии связи системы.

4. Заключение

В данной работе на основе приближенных численных методов, а именно метода конечных элементов (FEM) изучены донорные примесные состояния в квазиконической квантовой точке, при условии, что примесь находится в вершине квазиконической КТ. Методом FEM рассчитаны энергетические состояния и волновые функции системы как в присутствии, так и в отсутствие донорной примеси. Показано, что при относительной сплюснутости КТ плотность распределения электрона находится в середине КТ, а в вытянутом случае сдвигается в сторону вершины квазиконуса. Показано, что рост боковой грани приводит к спаду полной энергии системы из-за уменьшения энергии размерного квантования. При этом, при постоянной боковой грани, рост угла раствора приводит к спаду полной энергии. Также в условиях данной задачи исследована энергия связи донорной примеси. Кривые зависимостей энергии связи системы показывают аналогичное поведение в зависимости от геометрических параметров КТ.

ЛИТЕРАТУРА

1. **L. Jacak, P. Hawrylak, A. Wojs.** Quantum Dots. Springer Science & Business Media, Berlin, 2013.
2. **T. Chakraborty.** Quantum Dots: A Survey of the Properties of Artificial Atoms. Elsevier, Amsterdam, 1999.
3. **M.A. Mkrtchyan, D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan, S. Baskoutas, D.A. Firsov, M.Y. Vinnichenko.** Phys. E, **150**, 115703 (2023).
4. **J.A. Osorio, D. Caicedo-Paredes, J.A. Vinasco, A.L. Morales, A. Radu, R.L. Restrepo, J.C. Martínez-Orozco, A. Tiutiunnyk, D. Laroze, Nguyen N. Hieu, Huynh V. Phuc, M.E. Mora-Ramos, C.A. Duque.** Scien.Rep., **10**, 8961 (2020).
5. **M. Choubani, D. Makhlof, F. Saidi, H. Maaref.** Opt. and Quan. Electr., **52**, 1–15 (2020).

6. **K.S. Khachatryan, M.A. Mkrtchyan, D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan.** Phys. E, **134**, 114887 (2021).
7. **A.V. Nenashev, A.V. Dvurechenskii.** J. Appl. Phys., **127**, 154301 (2020).
8. **M. Grundmann, O. Stier, D. Bimberg.** Phys. Rev. B, **52**, 11969 (1995).
9. **G. Cantele, D. Ninno, G. Iadonisi.** J. of Phys.: Cond. Matt., **12**, 9019 (2000).
10. **M.A. Mkrtchyan, Y.S. Mamasakhlisov, D.B. Hayrapetyan, S. Baskoutas, H.A. Sarkisyan.** Heliyon, **10**, e34762 (2024).
11. **F. Rahimi, M.R. Kazerani Vahdani.** Opt. and Quan. Elec., **55**, 106 (2023).
12. **M. Dezhkam, A. Zakery.** Chin. Opt. Lett., **10**, 121901 (2012).
13. **I. Maouhoubi, R. En-nadir, K. El Bekkari, et al.,** Philos. Mag., **103**, 286, (2023).
14. **N.F. Johnson.** J. of Phys.: Cond. Matt., **7**, 965(1995).
15. **P.A. Sundqvist, S.Y. Volkov, Y.E. Lozovik, M. Willander.** Phys. Rev. B., **66**, 075335 (2002).
16. **E. Sadeghi, A. Avazpour.** Phys. B: Cond. Matt., **406**, 241 (2011).
17. **M. Solaimani.** Mat. Scien. and Engin.: B, **262**, 114694 (2020).
18. **R. Arraoui, A. Sali, A. Ed-Dahmouny, M. Jaouane, A. Fakkahi.** Superlatt. and Microstr., **159**, 107049 (2021).
19. **M. Jaouane, A. Sali, A. Fakkahi, R. Arraoui, A. Ed-Dahmouny, F. Ungan.** Phys. E, **144**, 115450 (2022).
20. **V. Holovatsky, M. Chubrey, O. Voitsekhivska.** Superlatt. and Microstr., **145**, 106642 (2020).
21. **L.T.D. Hien, L.T.N. Bao, D.D. Phuoc, H.J. Kim, C.A. Duque, D.N. Thao.** Nanomaterials, **13**, 1020, (2023).
22. **E.M. Kazaryan, L.S. Petrosyan, V.A. Shahnazaryan, H.A. Sarkisyan.** Comm. in Theor. Phys., **63**, 255, (2015).
23. **K.H. Huebner, D.L. Dewhirst, D.E. Smith, T.G. Byrom.** The finite element method for engineers. John Wiley & Sons 2001.

IMPURITY STATES IN A QUASICONIC QUANTUM DOT

KH.S. KHACHATRYAN, M.A. MKRTCHYAN

Donor impurity states in a quasi-conical quantum dot are theoretically investigated. The confinement potential is considered within the framework of the model with infinite walls. The problem is considered under the condition that the impurity is at the vertex of the quasi-conical quantum dot. The interaction potential between the impurity and the electron is considered as the Coulomb potential, based on the hydrogen atom model. Due to the complexity, the problem is solved using the approximate finite element method (FEM). The FEM method is used to calculate the energy states and wave functions of the system both in the presence and absence of the donor impurity. Based on the obtained results, the probability density of the electron cloud distribution in the quantum dot and the dependences of the impurity binding energy on the geometric parameters of the quasi-conical quantum dot are studied.