

## СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОНА В ВЫТЯНУТОЙ СФЕРОИДАЛЬНОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ

М.В. АЙРАПЕТЯН\*, А.Ж. МУРАДЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

\*e-mail: mhayrapetyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 9 апреля 2024 г.)

Рассмотрены стационарные состояния электрона в наноразмерной полупроводниковой квантовой точке сфероидальной формы глубокого задерживающего потенциала. Дискретный энергетический спектр и соответствующие волновые функции очень чувствительны к удлинению сфероида, особенно в области высоких значений эксцентриситета. Основное внимание в работе уделено выявлению закономерностей радиально-углового распределения волновых функций электронов, которые должны играть важную роль в угловом распределении фотонов, излучаемых квантовой точкой.

### 1. Введение

Квантовые точки (КТ) – это наноразмерные структуры в полупроводниковых гетероструктурах или коллоидных растворах, в которых движение носителей тока (электронов и дырок) пространственно ограничено [1–3]. Размеры КТ соизмеримы с длиной волны де Бройля внутреннего электрона или с боровским радиусом экситона. Поэтому в КТ возникает дискретный энергетический спектр частиц. Поскольку энергии состояний зависят от формы и размеров КТ и определенным образом управляемы, КТ широко используются в электронике и оптике, квантовых вычислениях, биосенсорах и других областях [4, 5]. Важно также использование КТ в качестве источников однофотонного света, что вызывает необходимость изучения энергетического спектра квантовой частицы в КТ и ее излучательных характеристик в условиях, близких к реальным [6, 7]. При изучении этих вопросов важным параметром, характеризующим КТ, помимо глубины ограничивающего потенциала (ширины запрещенной зоны окружающей среды), является ее форма.

В начальных исследованиях форма КТ предполагалась сферической, но в дальнейшем, в связи с развитием технологий синтеза и управления КТ в поле зрения появились также сфероидальная, линзовидная, пирамидальная и конусообразная формы [8–10]. Здесь, как правило, используются приближенные методы – вариационный метод, теория возмущений, адиабатическое приближение и др. [11–14]. Отметим, что сфероидальная форма КТ допускает, как минимум – в одночастичном приближении, точное аналитическое решение задачи [15].

В настоящей работе изучается пространственно-угловое распределение волновых функций электрона в вытянутой КТ, например, GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As. Уже при

линейных размерах 10–15 нм, представляющих основной интерес, нижние энергетические уровни находятся глубоко в потенциальной яме КТ, что дает возможность ограничиться моделью бесконечно глубокого потенциала. Выявлены и физически прокомментированы закономерности изменения энергетического спектра и пространственно-углового распределения волновой функции электрона в зависимости от параметров задачи. Некоторые характерные закономерности проиллюстрированы графически.

## 2. Вытянутая сфероидальная КТ и уравнение Шредингера

Рассмотрим задачу в вытянутых сфероидальных координатах  $(\xi, \eta, \phi)$  [16], что позволяет точно учесть граничные условия на поверхности КТ и тем самым определить энергетический спектр и волновые функции электрона в КТ. Их связь с декартовыми координатами задается формулами

$$x = f\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \cos \phi, \quad y = f\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \sin \phi, \quad z = f\xi\eta, \quad (1)$$

где  $2f$  – межфокусное расстояние,  $1 \leq \xi < \infty$ ,  $-1 \leq \eta \leq 1$ ,  $0 \leq \phi \leq 2\pi$ . Переменную  $\xi$  называют радиальной переменной,  $\eta$  – угловой переменной, а  $\phi$  является азимутальным углом. Нетривиальный характер преобразований (1) можно увидеть уже в том, что при  $f=0$ , то есть при попытке перехода непосредственно от сфероида к сфере, все декартовы координаты тождественно обращаются в нуль.

Если потенциал внутри КТ считать постоянным (и независимым от спина электрона), то сфероидальные переменные в уравнении Шредингера разделяются, и его решение  $\Psi(\xi, \eta, \phi)$  можно искать в виде произведения функций по каждой из этих переменных:

$$\Psi(\xi, \eta, \phi) = R(\xi)S(\eta)\Phi(\phi), \quad (2)$$

Азимутальная часть волновой функции имеет обычный для потенциалов с аксиальной симметрией вид  $\Phi(\phi) = (2\pi)^{-1} \exp(im\phi)$ ,  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Полярно-угловая часть  $S(\eta)$  характеризуется значением азимутального квантового числа  $m$  и целым числом  $l$ , нумерующим уровни центробежной энергии последовательностью  $l \geq |m|$ . То же относится и к радиальной сфероидальной функции  $R(\xi)$ .

Для представляющих интерес волновых функций  $R(\xi)$  и  $S(\eta)$  получаются уравнения одинокого вида:

$$\frac{d}{d\zeta} \left[ (\zeta^2 - 1) \frac{dF_{lm}}{d\zeta} \right] - \left[ \lambda_{lm} + \frac{m^2}{\zeta^2 - 1} + \gamma^2 (1 - \zeta^2) \right] F_{lm} = 0, \quad (3)$$

где (3) в случае радиальной переменной  $\zeta = \xi$  простирается в области  $[1, \infty)$ , а в случае полярной переменной  $\zeta = \eta$  – в области  $[-1, 1]$ .  $\lambda_{lm}$  – параметр разделения уравнения Шредингера по переменным  $\xi$  и  $\eta$ . Энергетический параметр задачи  $\gamma$  определен как  $\gamma = f\sqrt{2m_{\text{ef}} E} / \hbar$ , где  $m_{\text{ef}}$  – эффективная масса электрона.

Обозначим через  $R_s$  радиус сферы, эквивалентной по объему сфероиду, и на его основе введем энергетический масштабный параметр  $E_{\text{scale}} = \hbar^2 / 2m_{\text{ef}} R_s^2$ . Фокальное расстояние сфероиды  $f$  выражается через радиус  $R_s$  и эксцентриситет сфероиды  $\varepsilon$  соотношением  $f = \varepsilon R_s / \sqrt{1 - \varepsilon^2}$ . Значение переменной  $\xi$  для поверхности КТ обозначим через  $\xi_0$ . Оно связано с эксцентриситетом сфероиды по закону  $\varepsilon = 1 / \xi_0$ . В результате волновая функция задачи запишется в виде [15]:

$$\Psi(\xi, \eta, \phi) = \begin{cases} C S_{lm}^{(1)}(\gamma, \eta) R_{lm}^{(1)}(\gamma, \xi) e^{im\phi}, & 1 \leq \xi \leq \xi_0 \\ 0, & \xi > \xi_0 \end{cases}, \quad (4)$$

где  $C$  – нормировочная постоянная и использованы принятые в программе Wolfram Mathematica обозначения:  $S_{lm}^{(1)}$  – угловая вытянутая сфероидальная функция I рода,  $R_{lm}^{(1)}$  – радиальная вытянутая сфероидальная функция I рода. Тогда разрешенные значения энергии электрона при квантовом числе  $m$  и номера центробежного индекса  $l$  определяются из единственного трансцендентного уравнения

$$R_{lm}^{(1)}\left(\frac{\varepsilon}{\sqrt{1 - \varepsilon^2}} \sqrt{\mu}, \xi_0\right) = 0,$$

где  $\mu = E / E_{\text{scale}}$  и параметр  $\gamma$  выражен через эксцентриситет  $\varepsilon$  и энергию  $E$ . Для каждого его решения, нумерованного индексом  $n (= 0, 1, 2, \dots)$ , соответствующая волновая функция определяется по формуле (4), завершая тем самым формальную математическую часть решения задачи.

### 3. Численные расчеты и обсуждение результатов

Прежде чем приступить к изложению численных результатов, отметим, что из физики образования стационарных состояний сразу следует, что с уменьшением объема квантования все уровни энергии повышаются. Поэтому при исследовании зависимости энергетических уровней от формы (эксцентриситета  $\varepsilon$ ) сфероиды объем последнего следует сохранить постоянным [17]. Поведение при этом не всегда оказывается монотонно возрастающим или монотонно убывающим (рис.1). Дело в том, что с увеличением  $\varepsilon$  продольные размеры (вдоль оси  $z$ ) растут, а поперечные (в плоскости  $xOy$ ) – уменьшаются. Первый из них содействует спусканию энергетических уровней, а второй – повышению. Следовательно, результирующее поведение зависит от конкретного радиально-углового распределения. Одно, однако, безусловно: при больших вытянутостях (значениях эксцентриситета) сфероиды уменьшение его поперечных размеров становится все более важным, чем увеличение продольных размеров, и обеспечивает монотонное увеличение всех энергетических уровней, как видно на рис.1. При этом увеличение скорости роста с увеличением главного квантового числа  $n$  объясняется тем, что соответствующие волновые функции электрона в среднем удаляются от центра сфероиды и все больше испытывают деформацию

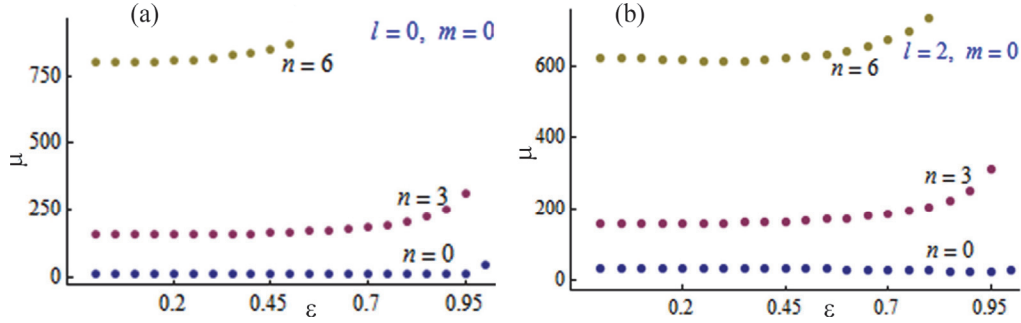


Рис.1. Зависимость энергетических уровней от эксцентриситета вытянутой эллипсоидальной КТ для некоторой последовательности  $n = 0, 3, 6$  энергетических уровней серий  $l = 0, m = 0$  (а) и  $l = 2, m = 0$  (б). В случае (а) уровни энергии монотонно возрастают, одновременно увеличивая скорость роста. В случае (б) при  $n = 0$  и  $n = 6$  закономерность иная: сначала происходит медленное снижение, которое лишь при относительно сильных удлинениях (больших значениях эксцентриситета) переходит в ускоряющийся рост. Прерывание последовательностей точек происходит из-за потери точности численных расчетов.

границы сфероида.

Радиальная волновая функция  $R_{lm}^{(l)}(\gamma, \xi)$  для произвольной степени вытянутости сфероида отлична от нуля на оси симметрии  $\xi = 1$  при отсутствии центробежной энергии с  $l = 0$  и обращается в нуль в случае  $l > 0$  (рис.2). При увеличении азимутального квантового числа  $m$  распределение перемещается к стенкам КТ.

Для физических процессов с участием КТ, помимо характера энергетического спектра и радиального распределения волновой функции по переменной  $\xi$ , важное значение имеет также полярное распределение по переменной  $\eta$ . Это особенно относится к эффективности и угловому распределению излучательных переходов, поскольку накладываются

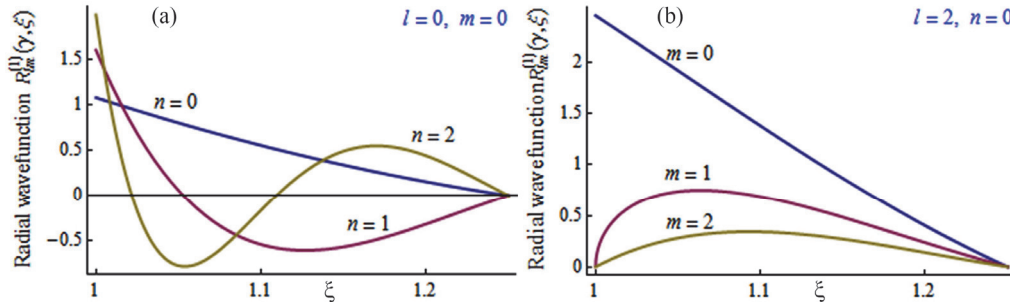


Рис.2. Распределение волновой функции электрона в КТ по переменной  $\xi$ , заменяющей радиальную переменную  $r$  сферической системы координат. Во избежание недоразумений следует отметить, что поскольку элемент объема в системе координат вытянутого сфероида не представляется произведением переменных  $\xi$  и  $\eta$  (а именно:  $dv = f^3(\xi^2 - \eta^2)d\xi d\eta d\phi$ ), то и нормировка волновых функций не происходит в пространствах отдельных переменных  $\xi$  (как и в случае данных графиков) и  $\eta$ , а в их общем пространстве.

распределения волновых функций разных энергетических уровней. В этом случае мы также остаемся в сфероидальных координатах и будем рассматривать угловое распределение на поверхности  $\xi = \text{const}$ .

Как и в случае сферического потенциала, в угловом распределении имеются определенные закономерности, а именно: для азимутального квантового числа  $m$  произвольного  $l$  оно имеет  $l - |m|$  узлов (нулей), как показано на рис.3а,b для граничных значений  $m = 0$  и  $m = 2$  случая  $l = 2$ . Качественно новой является зависимость от главного квантового числа  $n$ : по мере его увеличения угловое распределение сжимается вдоль оси симметрии сфероиды, как видно из последовательностей  $n = 0, 3$  и  $6$  на рисунках.

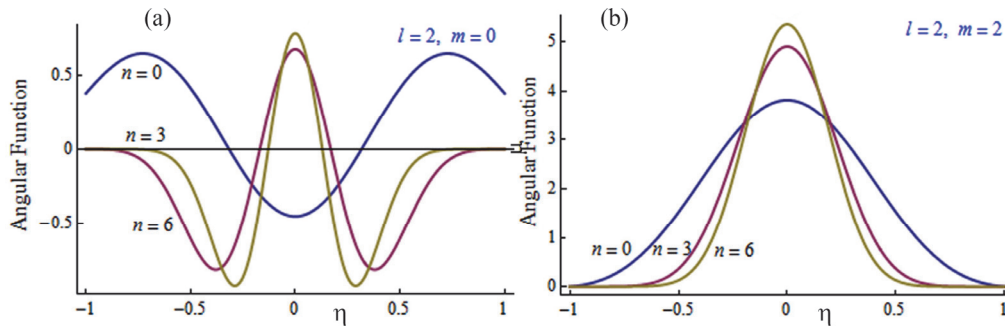


Рис.3. Угловые распределения волновой функции электрона в сфероидальной КТ для сериала  $l = 2$ . Случай (а) соответствует нижней границе  $m = 0$ , случай (б) – верхней границе  $m = 2$ . Для обоих случаев  $\xi_0 = 1.25$  (в единицах фокального расстояния  $f$ ), что соответствует значению эксцентриситета эллипсоида  $\varepsilon = 0.8$

#### 4. Заключение

В настоящей работе исследованы энергетический спектр и радиально-угловое распределение волновой функции электрона в сфероидальной КТ. Качественно новым в этом случае является то, что радиальные и угловые характеристики электронного состояния не являются независимыми, как в случае сферической КТ. В частности, зависимость энергетических уровней от эксцентриситета сфероиды при постоянном объеме последнего не всегда монотонно возрастает. Постоянно растущий характер становится обязательным в области относительно больших значений эксцентриситета, поскольку уменьшение поперечных размеров становится более важным для пространственного ограничения волновой функции, чем увеличение продольных размеров для ее высвобождения. С увеличением главного квантового числа радиальное распределение в среднем отдалается к краям КТ, а угловое распределение сжимается вдоль оси симметрии от выпуклых краев к центру сфероиды. Также дано качественное объяснение этим закономерностям.

Работа выполнена при финансовой поддержке Комитета образования и науки МОНКС РА в Лаборатории исследования и моделирования квантовых явлений ЕГУ.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **L. Jacak, P. Hawrylak, A. Wójs.** Quantum Dots: NanoScience and Technology, Springer Science & Business Media, 2013.
2. **W. Zhoua, J.J. Coleman.** Current Opinion in Solid State and Materials Science, **20**, 352 (2016).
3. Quantum Dots: Emerging Materials for Versatile Applications. N.T. Kalyani, S.J. Dhoble, M.M. Domanska, B. Vengadaesvaran, H. Nagabhushana, A.K. Arof (Ed.), Elsevier Ltd., Woodhead Publishing, Paperback ISBN: 9780323852784, 2023.
4. **V. Chugh, A. Basu, N.K. Kaushik, A. Kaushik, Y.K. Mishra, A.K. Basu.** Materials Today Electronics, **6**, 100067 (2023).
5. **K.E. Sapsford, T. Pons, I.L. Medintz, H. Mattoussi.** Sensors, **6**, 925 (2006).
6. **A. Kress, F. Hofbauer, N. Reinelt, M. Kaniber, H.J. Krenner, R. Meyer, G. Böhm, J.J. Finley.** Phys. Rev. B, **71**, 241304 (2005).
7. **D. Najer, I. Söllner, P. Sekatski, V. Dolique, M.C. Löbl, D. Riedel, R. Schott, S. Starosielec, S.R. Valentin, A.D. Wieck, N. Sangouard, A. Ludwig, R.J. Warburton.** Nature, **575**, 622 (2019).
8. **C.Y. Ngo, S.F. Yoon, W.J. Fan, S.J. Chua.** Phys. Rev. B, **74**, 245331 (2006).
9. **M. Sabaeian, A. Khaledi-Nasab.** Applied Optics, **51**, 4176 (2012).
10. **K. Kadam, S. L. Patil, H. Patil, P. Waifalkar, K. More, R. Kamat, T.D. Dongale.** J. Nano- Electron. Phys., **11**, 01013 (2019).
11. **D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan.** J. Contemp. Phys., **48**, 32 (2013).
12. **P. Harrison, A. Valavanis.** Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures, John Wiley @ Sons, Ltd., Chichester, UK, 2016.
13. **M. Alijabbari, A. Mehramiz, A. Mafi.** Superlattices and Microstructures, **133**, 106180 (2019).
14. **J.A. Vinasco, A. Radu, A. Tiutiunnyk, R.L. Restrepo, D. Laroze, E. Feddi, M.E. Mora-Ramos, A.L. Morales, C.A. Duque.** Superlattices and Microstructures, **138**, 106384 (2020).
15. **D.B. Hodge.** J. Math. Phys., **11**, 2308 (1970).
16. Handbook of Mathematical Functions: with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables. M. Abramowitz, I.A. Stegun (Ed.), Dower Publications, Inc., New York, 1970.
17. **A. Bagga, S. Ghosh, P.K. Chattopadhyay.** Nanotechnology, **16**, 2726 (2005).

## STATIONARY STATES OF AN ELECTRON IN A PROLATE SPHEROIDAL QUANTUM DOT

M.V. HAYRAPETYAN, A.Zh. MURADYAN

The stationary states of an electron in a nanosized semiconductor quantum dot of spheroidal shape with a deep confining potential are considered. The discrete energy spectrum and corresponding wave functions are very sensitive to the elongation especially in the region of high eccentricity values. The main attention in the work is paid to identifying the patterns of the radial-angular distribution of electron wave functions, which should play an important role in the angular distribution of photons emitted by a quantum dot.