

ФИЗИКА

УДК 621.315

Д. Б. Айрапетян^{1,2}, О. Х. Тевосян¹

**Электронные состояния и прямое межзонное поглощение
света в сферической квантовой точке с модифицирован-
ным потенциалом Пешля –Теллера**

(Представлено академиком Э. М. Казаряном 8/VI 2012)

Ключевые слова: *сферическая квантовая точка, модифицированный потенциал Пешля – Теллера, прямое межзонное поглощение света*

1. Введение. Прогресс современных полупроводниковых технологий сделал возможным производство низкоразмерных полупроводниковых структур, в которых движение носителей заряда (НЗ) ограничено в одном, двух и трех направлениях. К первому классу низкоразмерных полупроводников относятся размерно квантованные (РК) пленки, ко второму – РК проволоки различных сечений, а к третьему – квантовые точки (КТ) [1-3], выращенные в различных диэлектрических матрицах. В последние два-три десятилетия особенно возрос интерес к КТ различных форм и размеров [1, 4-6]. Важным отличием полупроводниковых КТ от вышеупомянутых низкоразмерных систем является полная квантованность энергетического спектра НЗ в них.

Ограничивающий потенциал в большинстве случаев с большой точностью аппроксимируется параболическим потенциалом. Однако в действительности параболический потенциал реализуется только для нижних энергетических уровней. Очевидно, что с ростом квантового числа ход ограничивающего потенциала расходится с параболическим. Для более успешной и реалистичной аппроксимации формируемого ограничивающего потенциала предложено использование модифицированного потенциала Пешля–Теллера (МППТ) [5,7].

В настоящей работе исследованы электронные состояния и межзонное поглощение света в сферической КТ с МППТ при режиме сильного размерного квантования.

2. Электронные состояния. Рассмотрим движение частицы (электрон, дырка) в сферической КТ с ограничивающим МППТ при режиме сильного размерного квантования. При этом энергия кулоновского

взаимодействия между электроном и дыркой намного меньше, чем энергия, обусловленная стенками КТ. Тогда можно в гамильтониане системы пренебречь членом, характеризующим кулоновское взаимодействие между электроном и дыркой. В этом случае задача сводится к нахождению энергетических уровней электрона и дырки по отдельности. В декартовых координатах для потенциальной энергии частицы можно написать

$$U(X, Y, Z) = \sum_{i=1}^3 \left(\tilde{U}_i - \tilde{U}_i / \operatorname{ch}^2 \left(\frac{Q_i}{\tilde{\beta}_i} \right) \right), \quad (1)$$

где \tilde{U}_i и $\tilde{\beta}_i$ – соответственно, глубина и полуширина потенциальной ямы, $i = 1, 2, 3$, $Q_i = X, Y, Z$ [7]. На рис.1, а, б приведены зависимости потенциальной энергии частицы от полуширины и глубины потенциальной ямы. Радиус сферической КТ связан с полушириной потенциальной ямы соотношением $R_0 = \gamma_i \tilde{\beta}_i$, где параметр γ_i определяется из эксперимента.

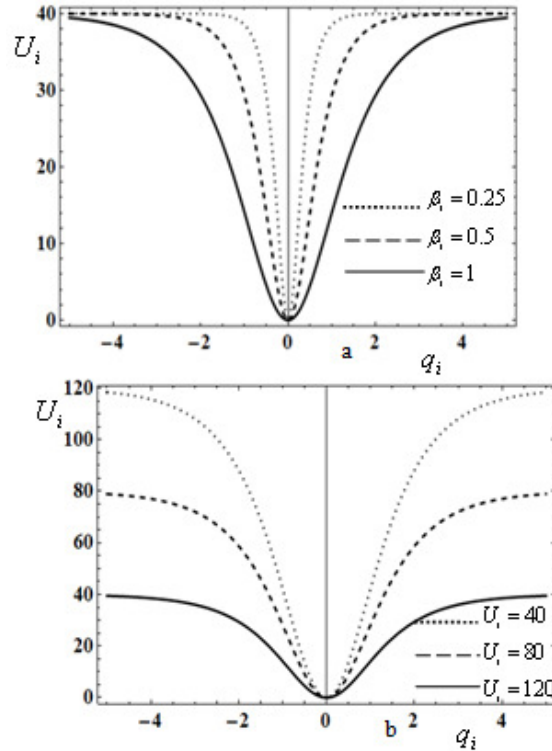


Рис. 1. Модифицированный потенциал Пешля–Теллера: а – для различных значений полуширины потенциальной ямы; б – для различных значений глубины потенциальной ямы.

Гамильтониан системы в безразмерных величинах можно представить в виде суммы гамильтонианов подсистем

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^3 \hat{H}_i, \quad (2)$$

где

$$\hat{H}_i = -\frac{\partial^2}{\partial q_i^2} - \frac{U_i}{\text{ch}^2\left(\frac{q_i}{\beta_i}\right)}. \quad (3)$$

Здесь введены обозначения: $\hat{H}_i = \frac{\hat{H}_i}{E_R}$, $q_i = \frac{Q_i}{a_B}$, $q_i = x, y, z$, $U_i = \frac{\tilde{U}_i}{E_R}$,

$\beta_i = \frac{\tilde{\beta}_i}{a_B}$, $E_R = \frac{\hbar^2}{2m_e^* a_B^2}$ – эффективная энергия Ридберга, $a_B = \frac{\kappa \hbar^2}{m_p^* e^2}$ –

эффективный борковский радиус частицы, κ – диэлектрическая проницаемость, m_p^* – эффективная масса частицы, e – заряд частицы.

Полную волновую функцию системы ищем в виде

$$\Phi(x, y, z) = \prod_{i=1}^3 \Psi_i(q_i). \quad (4)$$

Тогда задача сводится к нахождению энергетических уровней подсистем по отдельности. После подстановки волновых функций подсистем в соответствующее уравнение Шредингера, введя новые

обозначения $\xi_i = th\left(\frac{r}{\beta_i}\right)$, $s_i = \frac{1}{2}[-1 + \sqrt{1 + 4\beta_i^2 U_i}]$, получаем

$$\frac{d}{d\xi_i} \left[(1 - \xi_i^2) \frac{d\Psi_i(\xi_i)}{d\xi_i} \right] + \left[s_i(s_i + 1) - \frac{\varepsilon_i}{1 - \xi_i^2} \right] \Psi_i(\xi_i) = 0, \quad (5)$$

где введено обозначение $\varepsilon_i = \frac{E_i}{E_R}$. Решение уравнения

Error! Reference source not found. ищем в виде $\Psi_i(\xi_i) = (1 - \xi_i^2)^{\varepsilon_i/2} \Omega(\xi_i)$ и тогда для $\Omega(\xi_i)$ получаем уравнение Куммера [8]

$$\begin{aligned} & \frac{1 - \xi_i}{2} \left(1 - \frac{1 - \xi_i}{2} \right) \Omega''(\xi_i) + (\varepsilon_i + 1)(1 - 2s_i) \Omega'(\xi_i) - \\ & - (\varepsilon_i - s_i)(\varepsilon_i + s_i + 1) \Omega(\xi_i) = 0, \end{aligned} \quad (6)$$

решение которого задается гипергеометрической функцией Гаусса

$$\Omega(\xi_i) = {}_2F_1 \left\{ \varepsilon_i - s_i, \varepsilon_i + s_i + 1, \varepsilon_i + 1, \frac{1 - \xi_i}{2} \right\}. \quad (7)$$

Окончательно волновая функция системы примет следующий вид:

$$\Phi_p(x, y, z) = C \prod_{i=3}^3 \left(1 - th^2 \left(\frac{q_i}{\beta_i} \right) \right)^{\varepsilon_i/2} {}_2F_1 \left\{ \varepsilon_i - s_i, \varepsilon_i + s_i + 1, \varepsilon_i + 1, \frac{1 - th(q_i/\beta_i)}{2} \right\} \quad (8)$$

где C – нормировочная константа, а энергетический спектр частицы будет определяться выражением

$$\varepsilon_p = \sum_{i=1}^3 \left(-\frac{1}{4\beta_i^2} \right) \left[-(1 + 2n_i) + \sqrt{1 + 4\beta_i^2 U_i} \right]^2 \quad (9)$$

где n_i – квантовые числа, которые принимают значения $n_i = 0, 1, 2, \dots$

3. Прямое межзонное поглощение света. Перейдем к рассмотрению прямого межзонного поглощения света в квантовой точке с МППТ в режиме сильного РК, когда кулоновским взаимодействием между электроном и дыркой можно пренебречь. Рассмотрим случай тяжелой дырки, когда $m_e^* \ll m_h^*$, где m_e^* и m_h^* – эффективная масса электрона и дырки соответственно. Тогда коэффициент поглощения определяется выражением [9]

$$K = A \sum_{\nu, \nu'} \left| \int \Phi_\nu^e \Phi_{\nu'}^h d\vec{r} \right|^2 \delta(\hbar\Omega - E_g - E_\nu^e - E_{\nu'}^h), \quad (10)$$

где ν и ν' – наборы квантовых чисел, соответствующих электрону и тяжелой дырке, E_g – ширина запрещенной зоны массивного полупроводника, Ω – частота падающего света, A – величина, пропорциональная квадрату матричного элемента, взятого по блоховским функциям.

Для пороговых частот, учитывая выражения для энергии электрона и дырки (см. уравнение (9)) получаем

$$W_{000} = 1 + \sum_{i=1}^3 \left(\frac{d^2}{2\tilde{\beta}_i^2} \left(\frac{\mu}{m_e^*} \sqrt{1 + 4 \left(\frac{\tilde{\beta}_i}{d} \right)^2 \frac{\tilde{U}_i m_e^*}{E_g \mu}} + \frac{\mu}{m_h^*} \sqrt{1 + 4 \left(\frac{\tilde{\beta}_i}{d} \right)^2 \frac{\tilde{U}_i m_h^*}{E_g \mu}} - 1 \right) \right), \quad (11)$$

где $d = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2\mu E_g}}$, $W_{000} = \frac{\hbar\Omega_{000}}{E_g}$, $\mu = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*}$ – приведенная эффективная

масса экситона.

Рассмотрим теперь правила отбора при квантовых переходах. Отметим, что возможны переходы между энергетическими уровнями с любыми соответствующими квантовыми числами. Иначе говоря, разрешены переходы с любого n_i к любому n_i' .

4. Обсуждение. Перейдем к обсуждению полученных результатов. На рис. 2 приведена трехмерная зависимость энергии электрона от величины полуширины и глубины потенциальной ямы. Отметим, что численные расчеты сделаны для сферической КТ с МППТ из *GaAs* со следующими параметрами: $m_e^* = 0.067m_e$, $m_h^* = 0.45m_e$, $\kappa = 13.8$, $E_R = 5.275$ мэВ, $a_B = 104$. Все нижеприведенные расчеты сделаны для случая, когда параметры сферической КТ по всем направлениям одинаковы ($\beta_1 = \beta_2 = \beta_3 \equiv \beta$ и

$U_1 = U_2 = U_3 \equiv U_0$). Как видно из рис. 2, с увеличением полуширины потенциальной ямы энергия электрона уменьшается, что является следствием уменьшения вклада размерного квантования. Нужно отметить, что с увеличением полуширины потенциальной ямы уменьшаются также межуровневые расстояния энергии, иными словами, энергетические уровни сближаются. Обратная картина наблюдается при изменении глубины потенциальной ямы: с увеличением глубины потенциальной ямы энергия электрона увеличивается, а энергетические уровни отдаляются. Это обусловлено тем, что увеличивается вклад стенок сферической КТ с МППТ в энергию электрона. Частота перехода между основным уровнем ($n_1 = n_2 = n_3 = 0$) и возбужденным уровнем ($n_1 = n_2 = n_3 = 1$), при фиксированных значениях $\beta = 1$, $U_0 = 40$ получается $\omega = 4.68 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$, что соответствует инфракрасному диапазону спектра.

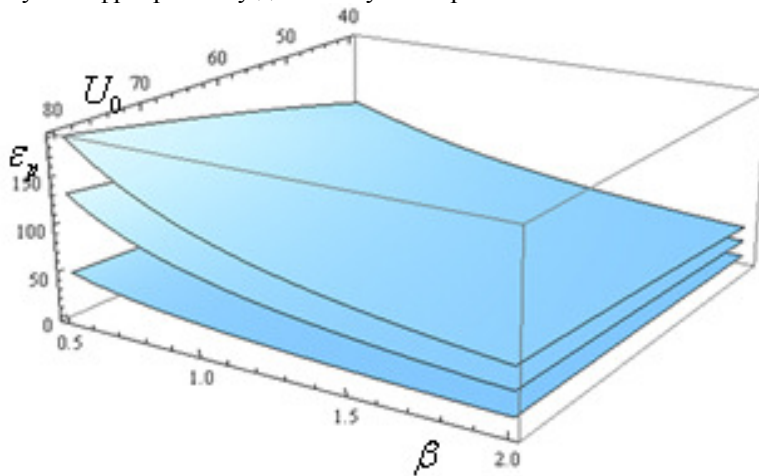


Рис. 2. Трехмерная зависимость энергии электрона в сферической квантовой точке от глубины и полуширины модифицированного потенциала Пешля – Теллера.

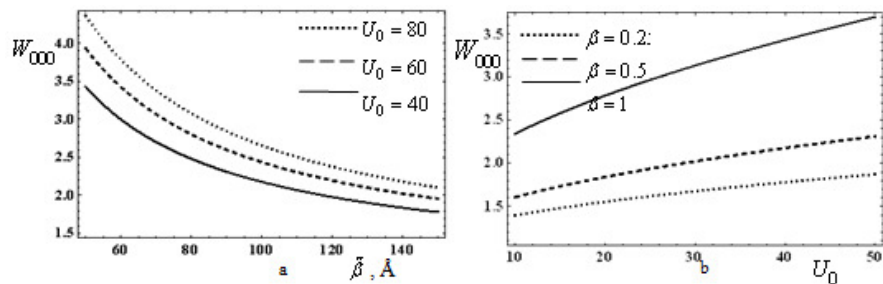


Рис. 3. Зависимость края поглощения от полуширины МППТ при фиксированных значениях глубины ямы (а) и глубины ямы при фиксированных значениях полуширины МППТ (б).

На рис. 3, а, б приведены зависимости порогов поглощения, соответственно, от полуширины и глубины потенциальной ямы при режиме сильного размерного квантования. Как видно из рисунков, с уменьшением полуширины потенциальной ямы край поглощения увеличивается. Это является следствием того, что с уменьшением параметра β ширина эффективной запрещенной зоны увеличивается. На рис. 4 приведена схематическая иллюстрация, наглядно показывающая увеличение ширины эффективной запрещенной зоны при изменении потенциальной ямы, когда полуширина β уменьшается. Обратная картина наблюдается при уменьшении глубины потенциальной ямы. В этом случае ширина эффективной запрещенной зоны уменьшается. Резюмируя вышесказанное, отметим, что уменьшение полуширины потенциальной ямы приводит к “синему” смещению пороговых частот, а уменьшение глубины потенциальной ямы – “красному” смещению пороговых частот.

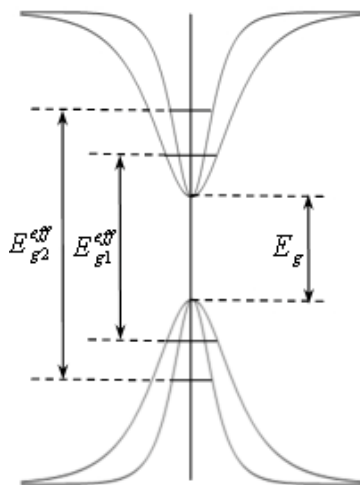


Рис. 4. Схематическая иллюстрация изменения ширины эффективной запрещенной зоны.

¹Российско-Армянский (Славянский) университет

²Государственный инженерный университет Армении

Д. Б. Айрапетян, О. Х. Тевосян

Электронные состояния и прямое межзонное поглощение света в сферической квантовой точке с модифицированным потенциалом Пешля – Теллера

Исследованы электронные состояния и прямое межзонное поглощение света в сферической квантовой точке с модифицированным потенциалом Пешля–Теллера. Получены аналитические выражения для энергии и волновой функции частицы. Выявлена зависимость края поглощения от полуширины и глубины потенциальной ямы в режиме сильного размерного квантования. Показано, что уменьшение полуширины потенциальной ямы приводит к “синему” смещению порого-

вых частот, а уменьшение глубины потенциальной ямы – “красному” смещению пороговых частот. Получены правила отборов для квантовых переходов.

Դ. Բ. Հայրապետյան, Հ. Խ. Թևոսյան

Էլեկտրոնային վիճակները և լույսի ուղիղ միջգոտիական կլանումը Պեշել-Թելլերի ձևափոխված պոտենցիալով գնդային քվանտային կետում

Հետազոտվել են Պեշել-Թելլերի ձևափոխված պոտենցիալով գնդային քվանտային կետում էլեկտրոնային վիճակները և լույսի ուղիղ միջգոտիական կլանումը: Ստացվել են վերլուծական արտահայտություններ մասնիկի էներգիական սպեկտրի և ալիքային ֆունկցիայի համար: Չափային քվանտացման ուժեղ ռեժիմի դեպքում դուրս է բերվել կլանման շեմային հաճախությունների կախվածությունը փոսի խորությունից և կիսալայնությունից: Ցույց է տրվել, որ փոսի կիսալայնության փոքրացումը բերում է սահմանային հաճախությունների «կապույտ» շեղմանը, իսկ խորության փոքրացումը սահմանային հաճախությունների «կարմիր» շեղմանը: Ստացվել են քվանտային անցումների համար ջոկման կանոնները:

D. B. Hayrapetyan, H. Kh. Tevosyan

Electronic States and Direct Interband Light Absorption in a Spherical Quantum Dot with Modified Poschel – Teller Potential

Electronic states and direct interband light absorption in the spherical quantum dot with modified Pöschel-Teller potential have been investigated. Analytical expressions for the energy and wave function of particle have been obtained. Dependence of the absorption edge on the half-width and dept of the potential well in the regime of strong sized quantization have been revealed. It has been demonstrated that the reduction of the half-width potential well leads to the “blue” shift of threshold frequencies, and the reduction of the depth of potential well leads to the “red” shift of threshold frequency. Selection rules for quantum transitions have been obtained.

Литература

1. *Harrison P.* Quantum wells, wires and dots. Theoretical and computational physics. John Wiley & Sons Ltd, NY, 2005.
2. *Ղազարյան Է. Մ., Պետրոսյան Ս. Գ.,* Կիսահաղորդչային նանոէլեկտրոնիկայի ֆիզիկական հիմունքները, ՌՀՀ հրատարակչություն, Երևան, 2005:
3. *Willardson R. K.* - Ac. Press. 1999. V. 60.
4. *Այրապետյան Դ. Բ.* – Изв. НАН Армении. Физика. 2007. Т. 42. № 6. С. 442-449.
5. *Այրապետյան Դ. Բ., Двоян К. Г., Казарян Э.М., Чанчапанян А.А.* - ДНАН РА. 2008. Т. 108. N 4. P. 320-331.
6. *Atoyan M.S., Kazaryan E.M., Sarkisyan H.A.* - Physica E. 2004. V. 22, Issue 4. P. 860-866.
7. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М. Наука, 1989.
8. *Абрамовица М., Стигана И.* Справочник по специальным функциям. М. Наука. 1979.
9. *Ансельм И. А.* Введение в теорию полупроводников М. Наука, 1978.