

УДК 621. 315

Յ. Գ. Գրիգորյան

Примесные состояния в полусферической квантовой точке с полубесконечным ограничивающим потенциалом

(Представлено академиком Э. М. Казаряном 25/III 2014)

Ключевые слова: квантовая точка, полусфера, примесные состояния.

Введение. Спонтанно возникающие квантовые точки (КТ) в основном имеют линзообразную поверхность (так называемые квантовые линзы (КЛ)), и в частности может образоваться сферический сегмент с круговым сечением [1] (рис. 1). В работе [2] авторы теоретически исследовали электронные состояния в таких структурах. Сперва они рассмотрели полусферическую КТ (ПСКТ), а потом, в рамках обобщенной теории возмущений, для конформно отображенных операторов (modified Reylejgh-Schrodinger perturbation theory) исследовали электронные состояния в КЛ, мало отличающейся от ПСКТ. При этом для решения той же задачи в [3] был предложен значительно более простой оператор отображения, в результате чего для энергии системы получались простые аналитические выражения.

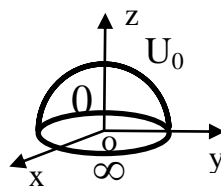


Рис. 1. Полусферическая квантовая точка.

В обеих задачах в качестве ограничивающего потенциала был выбран бесконечно высокий потенциальный барьер. С другой стороны, учет конечности потенциального барьера приближает задачу к реальной, однако значительно усложняет ее. В этой связи следует отметить работу [4], в которой были рассмотрены ПСКТ и КЛ с полубесконечным ограничивающим потенциалом. Вместе с тем в КТ могут образовываться примесные состояния. Наличие примеси в КТ может сильно повлиять на ее свойства. Поэтому вызывает интерес исследование примесных состояний в

ПСКТ с учетом конечности высоты ограничивающего потенциала, что и является целью данной работы.

Теория. Рассмотрим примесные состояния в ПСКТ с полубесконечным ограничивающим потенциалом. Гамильтониан системы имеет вид

$$\left\{ \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{\varepsilon r} + U(r, \theta) \right\} \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi), \quad (1)$$

где μ – эффективная масса электрона, ε – диэлектрическая проницаемость среды, а $U(r, \theta)$ – ограничивающий потенциал, который имеет вид

$$U(r, \theta) = U(r) + U(\theta), \quad (2)$$

где $U(r) = \begin{cases} 0 & r < r_0 \\ U_0 & r > r_0 \end{cases}$, $U(\theta) = \begin{cases} 0 & \theta < \pi/2 \\ \infty & \theta > \pi/2 \end{cases}$, r_0 – радиус полусферы.

Решение уравнения (1) ищем в виде

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi). \quad (3)$$

После разделения переменных для радиальной $R(r)$ и угловой $Y(\theta, \varphi)$ волновых функций получим соответственно следующие уравнения:

$$R''(r) + \frac{2}{r} R'(r) - \frac{2m}{h^2} \left(V(r) - E - \frac{e^2}{\varepsilon r} \right) \cdot R(r) + \frac{R(r)}{r^2} \lambda = 0, \quad (4)$$

$$\left(\Delta_{\theta, \varphi} - \frac{2m}{h^2} \cdot V(\theta) \right) Y(\theta, \varphi) = \lambda Y(\theta, \varphi), \quad (5)$$

где λ – константа разделения.

Сначала найдём собственную функцию и собственные значения уравнения (5), которые удовлетворяют граничному условию

$$Y(\pi/2, \varphi) = 0. \quad (6)$$

После подстановки $\lambda = -l(l+1)$, $x = \cos \theta$ и $Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta) \cdot e^{im\varphi}$, где m – целое число, для области $0 < \theta < \pi/2$ ($0 \leq x \leq 1$) получим

$$\left[(1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right) \right] \Theta(x) = 0. \quad (7)$$

Решение уравнения (6), которое конечно в интервале $0 \leq x \leq 1$, имеет вид

$$\Theta_1(x) = A P_l^{|m|}(x), \quad (8)$$

где $P_l^{|m|}(x)$ – присоединенная функция Лежандра.

Из граничного условия (6) $\Theta_1(0) = 0$ следует, что $l + |m| = 2p + 1$, где $p \in \mathbb{Z}$. m и p целые числа, следовательно, l тоже целое число. Из равенства $P_l^{|m|}(x) = P_{-l-1}^{|m|}(x)$ следует, что при замене l на $-l-1$ ($\forall l \in \mathbb{Z}$) ничего не меняется. Следовательно, можно взять только одно значение: или l , или $-l-1$. Так как l и $-l-1$ симметричны относительно $-\frac{1}{2}$, а также с

учетом того, что l целое число, следует, что $l \geq 0$. Если $l < |m|$, то $P_l^{|m|}(x) = 0$, следовательно, должно выполняться условие $l \geq |m|$.

Из условия нормировки для A находим

$$A = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2\pi(l+|m|)!}}. \quad (9)$$

Таким образом, решение угловой части уравнения Шредингера выражается через сферические функции

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2\pi(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta) \cdot e^{im\varphi}. \quad (10)$$

При этом $l > |m|$ и $l + |m| =$ нечетное число.

Перейдем к решению радиального уравнения Шредингера (4). Решение этого уравнения, когда $r < r_0$, имеет вид [5]

$$R_1(r) = C_1 e^{-\gamma_1 r} r^\ell {}_1F_1[\ell+1-k_1, 2\ell+2; 2\gamma_1 r], \quad (11)$$

где ${}_1F_1[a, b, z]$ – вырожденная гипергеометрическая функция первого рода, $\gamma_1 = \sqrt{-2\mu E/\hbar^2}$, $k_1 = e^2 \mu / \gamma_1 \hbar^2$, C_1 – нормировочный коэффициент.

В области $r > r_0$ решение (4) примет вид

$$R_2(r) = C_2 e^{-\gamma_2 r} r^\ell U[\ell+1-k_2, 2\ell+2; 2\gamma_2 r], \quad (12)$$

где $U[a, b, z]$ – вырожденная гипергеометрическая функция второго рода, $\gamma_2 = \sqrt{2\mu(U_0 - E)/\hbar^2}$, $k_2 = e^2 \mu / \gamma_2 \hbar^2$, C_2 – нормировочный коэффициент. Из стандартных условий для волновых функций и их первых производных в точке $r = r_0$ имеем

$$\begin{cases} R_1(r_0) = R_2(r_0) \\ R_1'(r_0) = R_2'(r_0) \end{cases} \quad (13)$$

или

$$\begin{cases} C_1 e^{-\gamma_1 r} r^\ell {}_1F_1[\ell+1-k_1, 2\ell+2; 2\gamma_1 r] = C_2 e^{-\gamma_2 r} r^\ell U[\ell+1-k_2, 2\ell+2; 2\gamma_2 r] \\ C_1 \left(e^{-\gamma_1 r} r^\ell {}_1F_1[\ell+1-k_1, 2\ell+2; 2\gamma_1 r] \right)' = C_2 \left(e^{-\gamma_2 r} r^\ell U[\ell+1-k_2, 2\ell+2; 2\gamma_2 r] \right)' \end{cases} \quad (14)$$

Система (14) относительно неизвестных C_1 и C_2 имеет нетривиальные решения только в случае равенства нулю детерминанта:

$$\begin{vmatrix} e^{-\gamma_1 r} r^\ell {}_1F_1[\ell+1-k_1, 2\ell+2; 2\gamma_1 r] & e^{-\gamma_2 r} r^\ell U[\ell+1-k_2, 2\ell+2; 2\gamma_2 r] \\ \left(e^{-\gamma_1 r} r^\ell {}_1F_1[\ell+1-k_1, 2\ell+2; 2\gamma_1 r] \right)' & \left(e^{-\gamma_2 r} r^\ell U[\ell+1-k_2, 2\ell+2; 2\gamma_2 r] \right)' \end{vmatrix} = 0. \quad (15)$$

Условие (15) есть трансцендентное уравнение относительно энергии системы E .

Наконец отметим, что волновые функции (10-12) полностью совпадают с волновыми функциями сферической КТ с примесью в центре, только с

тем различием, что орбитальное и магнитное квантовые числа должны удовлетворять условию $l + |m| = \text{нечетное число}$ [6].

Обсуждение результатов. Численные расчеты сделаны для системы Al As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As, когда $x = 0.351$. Тогда $\mu = 0.067m_e$, $U_0 = 262.5 \text{ meV}$ и $\varepsilon = 13.1$, где m_e – масса свободного электрона. Вычисления осуществлены в единицах $E_R = \frac{\hbar^2}{2\mu a_B^2}$ и $a_B = \frac{\hbar^2 \varepsilon}{\mu e^2}$. На рис. 2 приведены зависимости энергии электрона от радиуса полусферы r_0 для различных состояний.

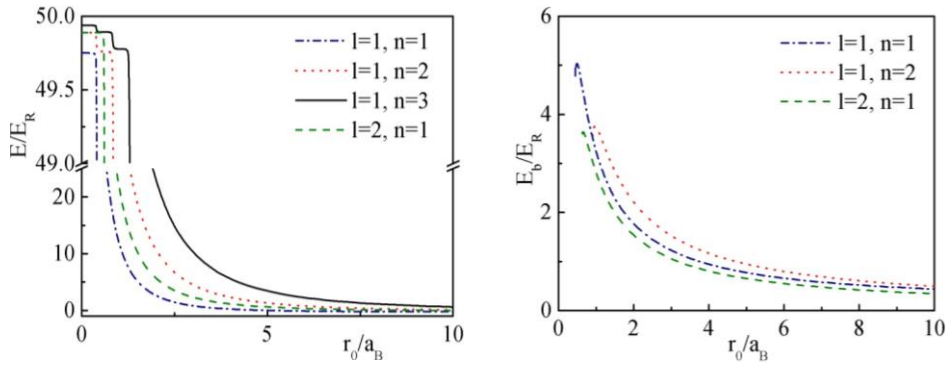


Рис. 2. Зависимости энергии электрона E от радиуса полусферы r_0 , когда $U_0 = 50E_R$, для состояний $l=1, n=1$, $l=1, n=2$, $l=1, n=3$, $l=2, n=1$.

Рис. 3 Зависимости энергий связи E_b от радиуса полусферы r_0 , когда $U_0 = 50E_R$, для состояний $l=1, n=1$, $l=1, n=2$, $l=2, n=1$.

Как видно из рис.1, когда радиус полусферы увеличивается, энергия электрона уменьшается и стремится для $l+n=2$ к $-E_R/4$, для $l+n=3$ к $-E_R/9$, а для $l+n=4$ к $-E_R/16$.

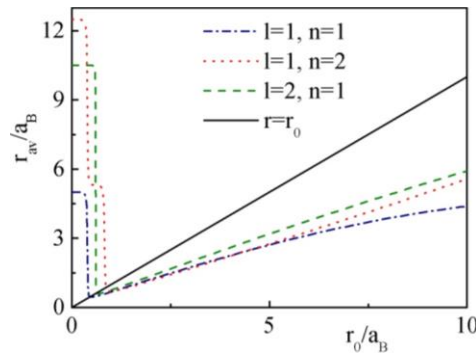


Рис. 4. Зависимости средних значений координаты r от радиуса полусферы r_0 , когда $U_0 = 50E_R$, для состояний $l=1, n=1$; $l=1, n=2$; $l=2, n=1$.

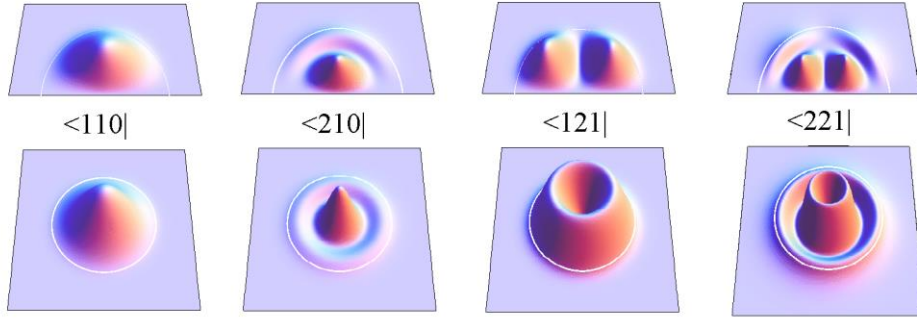


Рис. 5. Плотность вероятности нахождения электрона в любой точке плоскости $z = 0.5$ (нижняя строка) и в любой точке плоскости $x=0$ (верхняя строка), когда $r_0 = 1.09$, для состояний $n=1, l=1; m=0$, $n=2, l=1; m=0$, $n=1, l=2; m=1$, $n=2, l=2; m=1$.

Когда радиус уменьшается, энергия постепенно увеличивается и стремится для $l+n=2$ к $U_0 - E_R/4$, для $l+n=3$ к $U_0 - E_R/9$, а для $l+n=4$ к $U_0 - E_R/16$. В обоих случаях вырождение по l восстанавливается. Это объясняется тем, что при довольно больших радиусах электрон уже мало чувствует стенки и, следовательно, энергии стремятся к соответствующему значению энергии атома водорода. При $r_0 \rightarrow 0$ электрон ведет себя так, как будто находится в сплошной среде с потенциалом U_0 . Поэтому его энергия стремится к соответствующему значению энергии атома водорода в потенциальном поле U_0 .

На рис. 3 показаны зависимости энергии связи электрона E_b , которая определяется как $E_{nlb} = \tilde{E}_{nl} - E_{nl}$, где \tilde{E}_{nl} – энергия электрона в ПСКТ без примеси [4], от радиуса полусферы. Из рисунка видно, что энергия связи для больших радиусов стремится к нулю. Когда радиус уменьшается, E_b достигает своего максимума и резко убывает. Максимум соответствует тому значению радиуса r_0 , при котором среднее значение координаты r достигает своего минимума (см. рис. 4), т.е. можно сказать, что электрон находится на ближайшем расстоянии от примеси.

На рис. 4 приведены зависимости средних значений координаты r_{av} от радиуса полусферы для различных состояний электрона. Как видно из рисунка, с увеличением радиуса r_0 r_{av} увеличивается и соответственно стремится к среднему значению координаты r электрона в атоме водорода. С уменьшением радиуса r_{av} постепенно уменьшается и, достигнув своего минимума, резко увеличивается, что соответствует ситуации, когда электрон связан с примесным центром, будучи в окружающей КТ среде. Таким образом, имеет место явление квантового выброса.

На рис. 5 показаны плотности вероятности нахождения электрона в любой точке плоскости $z = 0.5$ (нижняя строка) и в любой точке плоскости $x = 0$ (верхняя строка), когда $r_0 = 1.09$, для его различных состояний. Белые круги и полукруги показывают границу КТ. Из рисунка можно увидеть, что при увеличении n , при фиксированном l и m появляется еще один пик (см. 1-е и 2-е состояния, а также 3-е и 4-е состояния). Аналогичная ситуация возникает и для квантового числа l (см. 1-е и 3-е состояния, а также 2-е и 4-е состояния). Отметим еще, что когда увеличивается n , новый пик появляется по радиальному направлению, а когда l – по угловому.

Автор благодарен Э.М. Казаряну и Л.С. Петросяну за постановку задачи, а также А.А. Саркисяну за постоянный интерес к работе и полезные советы.

Российско-Армянский (Славянский)
государственный университет

Յ. Գ. Գրիգորյան

Примесные состояния в полусферической квантовой точке с полубесконечным ограничивающим потенциалом

Исследованы примесные состояния в полусферической квантовой точке с полубесконечным ограничивающим потенциалом. Показано, что волновые функции электрона полностью совпадают с волновыми функциями электрона в сферической квантовой точке с примесью в центре, только с тем различием, что орбитальное квантовое число l и магнитное квантовое число m должны иметь разные четности. Также показано, что энергия связи электрона в зависимости от радиуса полусферы имеет максимум и этот максимум соответствует тому значению радиуса, при котором электрон находится на ближайшем расстоянии от примеси.

Չ. Ն. Գրիգորյան

Խառնուրդային վիճակները կիսաանվերջ սահմանափակող պոտենցիալով քվանտային կետում

Դիտարկված են խառնուրդային վիճակները կիսաանվերջ սահմանափակող պոտենցիալով քվանտային կետում: Ցույց է տրված, որ ալիքային ֆունկցիաներն ամբողջովին համընկնում են խառնուրդի կենտրոնում սֆերիկ քվանտային կետի ալիքային ֆունկցիաների հետ, միայն այն տարբերությամբ, որ ուղեծրային քվանտային թիվը l -ը, և մագնիսական քվանտային թիվը m -ը, պետք է տարբեր կենտրոններ ունենան: Ցույց է տրված նաև, որ էլեկտրոնի կապի էներգիան կախված կիսաանվերջ շառավղից, ունի մաքսիմում, և որ այդ մաքսիմումը համապատասխանում է շառավղի այն արժեքին, որի դեպքում էլեկտրոնը գտնվում է խառնուրդին ամենամոտ վիճակում:

Z. H. Grigoryan

Impurity States in Semi-Spherical Quantum Dots with Semifinite Confinement Potential

Impurity states in semi spherical QD with semifinite confinement potential are investigated. It is shown that the wave functions of the electron coincide with the wave functions of the electron in a spherical QD with an impurity in the center. The only difference is that the orbital quantum number l and magnetic quantum number m have different parity. It is also shown that the binding energy depending on the radius of the semisphere has a maximum, and this maximum corresponds to the value of the radius at which the electron is at the nearest distance from the impurity.

Литература

1. *Liao X., Zou J., Duan X., Cockayne D., Leon R., Lobo C.* - Phys. Rev. B. 1998. V. 58. R4235.
2. *Rodriguez A., Giner C., Ulloa S., Antuna J.* - Phys. Rev. B. 2001. V. 63. 125319.
3. *Петросян Л.С.* В: Сборник трудов конференции «Лазерная физика-2005». 11 – 14 октября 2005. Изд. «Гитутюн» НАН РА. 2006. С. 139 – 143.
4. *Grigoryan Z.G., Petrosyan L.S., Kazaryan E.M.* In: Conference ICSMN-2013, May 24-26.
5. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М. Наука. 1989. 768 с.
6. *Petrosyan L.S.* In: Proceedings of the 2nd Annual Scientific Conference of Russian-Armenian (Slavonic) State University. 2007. P. 249-258.