

УДК 621.315

Յ. Գ. Գրիգորյան<sup>1</sup>, Լ. Տ. Սետրյան<sup>1,2</sup>, ակադեմիկ Է. Մ. Կազարյան<sup>1</sup>

**Примесные состояния в эллипсоидальных и  
линзообразных квантовых точках с конечным  
ограничивающим потенциалом**

(Представлено 25/VII 2014)

**Ключевые слова:** *квантовая точка, эллипсоид, линза, примесные состояния.*

**Введение.** Последние десятилетия квантовые точки (КТ) очень интенсивно исследуются как теоретически, так и экспериментально. Благодаря своим уникальным свойствам, эти структуры широко используются в разных областях высокотехнологичной промышленности: в дисплеях, лазерах, сенсорах и т. п. [1-3]. Современные методы выращивания КТ позволяют получать структуры сферической, эллипсоидальной, цилиндрической, пирамидальной, линзообразной и других форм (см. напр. [4-10]).

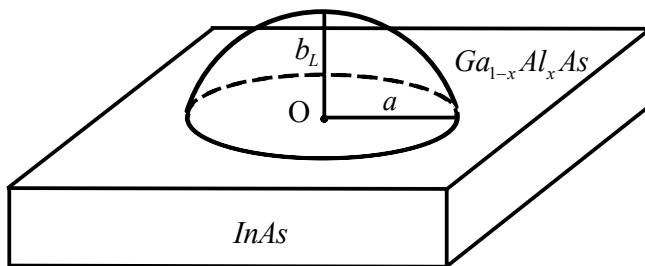


Рис. 1. Линзообразная квантовая точка.

В частности, в результате спонтанного распада на островки тонкого слоя одного материала, осажденного на поверхности другого, отличающегося постоянной решеткой (например InAs/CaAs), могут образоваться линзообразные КТ, у которых высота мало отличается от радиуса основания

( $b_L/a \approx 1$ , см. рис. 1.) [11]. Следует отметить, что форма и размеры КТ очень сильно влияют на ее физические свойства, и так как в процессе роста КТ возникают деформации ее поверхности, то возникает необходимость учета этого обстоятельства при описании физических процессов в КТ. С другой стороны, существование примеси тоже может оказать большое воздействие на характеристики КТ [12-15]. В связи с этим следует отметить, что авторами [16] в рамках теории возмущений был предложен метод, с помощью которого можно определить воздействие деформации внешней формы КТ на ее электронные состояния. Если рассмотреть линзообразную форму КТ как малую деформацию полусферической, а эллипсоидальную – сферической, то этим методом можно учесть влияние таких деформаций на примесные состояния, соответственно в полусферической и сферической КТ. Это и является целью данной работы.

**2. Теория.** Рассмотрим КТ по форме, мало отличающейся от сферической. Поверхность КТ и потенциальную энергию представим в следующем виде [17]:

$$r_s = r_0 (1 + f(\theta, \varphi)), \quad (1)$$

$$U(r) = \begin{cases} U_1(r), & r < r_s \\ U_2(r), & r > r_s \end{cases}, \quad (2)$$

где  $f(\theta, \varphi) \ll 1$  – некоторая функция,  $U_1(r)$  и  $U_2(r)$  – потенциалы, зависящие только от радиальной координаты.

Как было показано в [16], подобную задачу можно решить в рамках теории возмущений. В качестве невозмущенной задачи были рассмотрены электронные состояния в сферической КТ с ограничивающим потенциалом

$$U(r) = \begin{cases} U_1(r), & r < r_0 \\ U_2(r), & r > r_0 \end{cases}. \quad (3)$$

В этом случае волновую функцию невозмущенной задачи можно представить как произведение

$$\Psi_{nlm}^0(r, \theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi) \begin{cases} R_{1nl}(E_{nl}^0, r) & r < r_0 \\ R_{2nl}(E_{nl}^0, r) & r > r_0 \end{cases}, \quad (4)$$

где  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  – сферические гармоники,  $R_{1nl}(E_{nl}^0, r)$  и  $R_{2nl}(E_{nl}^0, r)$  – радиальные волновые функции.  $E_{nl}^0$  – энергия невозмущенной задачи. Тогда, как показано в [16], поправки к энергии  $\Delta E_{nlm}$  состояния, описываемого квантовыми числами  $n, l, m$ , находятся из условия

$$\text{Det}(d_{ij}^{l,m,n}) = 0, \quad (5)$$

где  $d_{ij}^{n,l,m} = T_{nl} f_{ij} + \delta_{ij} \Delta E_{nlm}$ ,

$$T_{nl} = \frac{\left( R_{1nl}^{(0,2)}(E_{nl}^0, r_0) - R_{2nl}^{(0,2)}(E_{nl}^0, r_0) \right) r_0}{\left( R_{1nl}^{(1,1)}(E_{nl}^0, r_0) - R_{2nl}^{(1,1)}(E_{nl}^0, r_0) - R_{2nl}^{(0,1)}(E_{nl}^0, r_0) \frac{R_{1nl}^{(1,0)}(E_{nl}^0, r_0) - R_{2nl}^{(1,0)}(E_{nl}^0, r_0)}{R_{1nl}(E_{nl}^0, r_0)} \right)}, \quad (6)$$

$$f_{lmn'} = \int Y_{lm}^*(\theta, \varphi) f(\theta, \varphi) Y_{lm'}(\theta, \varphi) d\Omega, \quad (7)$$

$\delta_{ij}$  – символ Кронекера.

Нашей целью будет описание примесных состояний в эллипсоидальной и линзообразной КТ на основе приведенного выше механизма расчетов.

**2. 1. Эллипсоидальная КТ.** Рассмотрим примесные состояния в эллипсоидальной КТ, по форме мало отличающейся от сферической. Для ограничивающего потенциала воспользуемся моделью прямоугольной потенциальной ямы конечной высоты. Тогда для потенциальной энергии примесного электрона, когда примесь находится в центре эллипсоида, можем записать

$$U^e(r) = \begin{cases} U_1^e(r) = -\frac{e}{\varepsilon r^2}, & r < r_s^e \\ U_2^e(r) = U_0^e - \frac{e}{\varepsilon r^2}, & r > r_s^e \end{cases}, \quad (8)$$

где  $\varepsilon$  – диэлектрическая проницаемость материала КТ и окружающей среды (мы считаем, что в обоих случаях значение  $\varepsilon$  одно и то же).

В декартовых координатах поверхность эллипсоида описывается уравнением

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1, \quad (9)$$

где  $a$ ,  $b$ ,  $c$  полуоси эллипсоида. Пусть  $a$  – наименьшая полуось эллипсоида,  $b = a(1 + \alpha_e k)$  и  $c = a(1 + \alpha_e)$ , где  $\alpha_e$  и  $k$  параметры задачи, описывающие связь между полуосями:  $0 < \alpha_e \ll 1$  и  $0 < \alpha_e k \ll 1$ . Иначе говоря, эллипсоид мало отличается от сферы. Когда  $k = 0$  или  $1$ , реализуются вытянутый или же сплюснутый эллипсоиды вращения соответственно [5]. Из условия равенства объёмов эллипсоида и сферы с радиусом  $r_0^e$  в первом приближении по  $\alpha_e$  можно представить связь между  $r_0^e$  и  $a$ , а также дать явный вид функции  $f^e(\theta, \varphi)$ :

$$r_0^e = a \left( 1 + \alpha_e \frac{1+k}{3} \right), \quad (10)$$

$$f^e(\theta, \varphi) = \alpha_e \cos^2 \theta + \alpha_e k \sin^2 \theta \sin^2 \varphi - \alpha_e \frac{1+k}{3}. \quad (11)$$

Решения уравнения Шредингера для невозмущенной задачи, когда

$$\begin{aligned} U_1^e(r) &= -\frac{e}{\varepsilon r^2}, \\ U_2^e(r) &= U_0^e - \frac{e}{\varepsilon r^2}, \end{aligned} \quad (12)$$

известны и имеют вид [18]

$$\Psi_{nlm}^{e0}(r, \theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi) \begin{cases} R_{1nl}^e(E_{nl}^0, r) & r < r_0^e \\ R_{2nl}^e(E_{nl}^0, r) & r > r_0^e \end{cases}, \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned} R_{1nl}^e(E_{nl}^e, r) &= C_{1nl}^e e^{-\gamma_{1nl}^e r} r^\ell {}_1F_1[\ell+1-k_{1nl}^e, 2\ell+2; 2\gamma_{1nl}^e r], \\ R_{2nl}^e(E_{nl}^e, r) &= C_{2nl}^e e^{-\gamma_{2nl}^e r} r^\ell U[\ell+1-k_{2nl}^e, 2\ell+2; 2\gamma_{2nl}^e r], \end{aligned} \quad (14)$$

${}_1F_1[a, b, z]$  и  $U[a, b, z]$  – вырожденные гипергеометрические функции первого и второго родов соответственно,  $\gamma_{1nl}^e = \sqrt{-2\mu_e E_{nl}^e / \hbar^2}$ ,  $\gamma_{2nl}^e = \sqrt{2\mu_e (U_0^e - E_{nl}^e) / \hbar^2}$ ,  $k_{1nl}^e = e^2 \mu / \gamma_{1nl}^e \hbar^2$ ,  $k_{2nl}^e = e^2 \mu / \gamma_{2nl}^e \hbar^2$ ,  $\mu$  – эффективная масса электрона,  $C_{1nl}^e$  и  $C_{2nl}^e$  – нормировочные коэффициенты. Подставляя найденные волновые функции в интеграл (7) и производя интегрирование для  $f_{lmm'}$  получим

$$\begin{aligned} f_{lmm'}^e &= \alpha_e \left( \frac{2l(l+1) - 2m^2 - 1}{(2l-1)(2l+3)} - \frac{1}{3} \right) \delta_{mm'} + \\ &+ \alpha_e k \left( \frac{l(l+1) + m^2 - 1}{(2l-1)(2l+3)} \delta_{m, m'} + P_{lm} \delta_{m, m'-2} + P_{lm'} \delta_{m, m'+2} - \frac{1}{3} \right), \end{aligned} \quad (15)$$

$$\text{где } P_{lm} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{(l-m-1)(l-m)(l+m+1)(l+m+2)}{(2l+3)(2l-1)}}.$$

Далее из условия равенства нулю детерминанта (5) для энергетических поправок  $\Delta E_{nlm}^e$  ( $m = 0, \pm 1$ ) окончательно найдем

$$\begin{aligned} \Delta E_{n10}^e &= \frac{2}{15} T_{n1}^e \alpha_e (-2+k), \\ \Delta E_{n11}^e &= \frac{2}{15} T_{n1}^e \alpha_e (1-2k), \\ \Delta E_{n1-1}^e &= \frac{2}{15} T_{n1}^e \alpha_e (1+k), \end{aligned} \quad (16)$$

где  $T_{nl}^e$  определяется согласно (6).

**2. 2. Линзообразная КТ.** Теперь рассмотрим примесные состояния в линзообразной КТ, геометрически мало отличающейся от полусферы, когда примесь находится в центре основания линзообразной области. Пусть ограничивающий потенциал имеет вид

$$U^L(r, \theta) = U^L(r) + U^L(\theta), \quad (17)$$

где

$$U^L(r) = \begin{cases} -\frac{e^2}{\varepsilon r} & r < r_s^L \\ U_0^L - \frac{e^2}{\varepsilon r} & r > r_s^L \end{cases}, \quad (18)$$

$$U^L(\theta) = \begin{cases} 0 & \theta < \pi/2 \\ \infty & \theta > \pi/2 \end{cases} \quad (19)$$

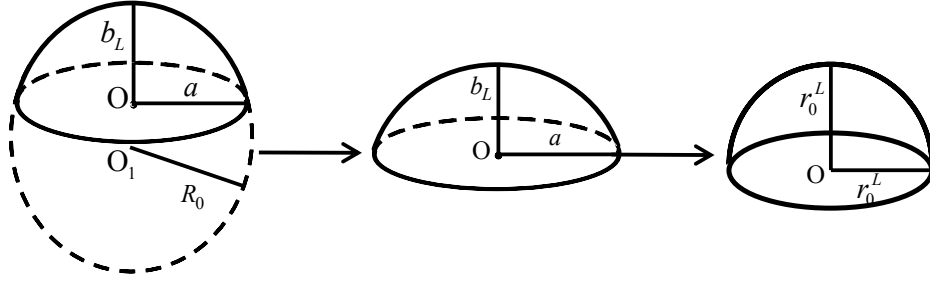


Рис. 2. Схематическое представление перехода от линзообразной области к полусферической.

В декартовых координатах поверхность линзы описывается уравнением

$$x^2 + y^2 + (z + R_0 - b_L)^2 = R_0^2, \quad (20)$$

где  $R_0$  радиус сферы, от которой отсечена линзообразная часть,  $b_L$  – высота линзы (см. рис. 2). Пусть  $b_L = R_0(1 - \alpha_L)$ , где  $0 \leq \alpha_L \ll 1$ , т.е. линза мало отличается от полусферы. С учетом равенства объёмов линзы и полусферы с радиусом  $r_0^L$  в первом приближении по  $\alpha_L$  получим  $r_0^L = R_0 \left(1 - \frac{\alpha_L}{2}\right)$ ,

$$f^L(\theta, \varphi) = \frac{\alpha_L}{2} - \alpha_L \cos \theta.$$

В случае полусферической КТ решения уравнения Шредингера для невозмущенной задачи, когда

$$\begin{aligned} U_1^L(r) &= -\frac{e}{\epsilon r^2}, \\ U_2^L(r) &= U_0^L - \frac{e}{\epsilon r^2}, \end{aligned} \quad (21)$$

имеют вид [13]

$$\Psi_{nlm}^{L0}(r, \theta, \varphi) = \begin{cases} 0 & \theta > \pi/2 \\ Y_{lm}(\theta, \varphi) R_{1nl}^L(E_{nl}^{L0}, r) & \theta < \pi/2, r < r_0^L \\ Y_{lm}(\theta, \varphi) R_{2nl}^L(E_{nl}^{L0}, r) & \theta < \pi/2, r > r_0^L \end{cases}, \quad (22)$$

где

$$\begin{aligned} R_{1nl}^L(E, r) &= C_{1nl}^L e^{-\gamma_{1nl}^L r} r^\ell {}_1F_1[\ell + 1 - k_{1nl}^L, 2\ell + 2; 2\gamma_{1nl}^L r], \\ R_{2nl}^L(E, r) &= C_{2nl}^L e^{-\gamma_{2nl}^L r} r^\ell U[\ell + 1 - k_{2nl}^L, 2\ell + 2; 2\gamma_{2nl}^L r], \end{aligned} \quad (23)$$

$\gamma_{1nl}^L = \sqrt{-2\mu E_{nl}^L/\hbar^2}$ ,  $\gamma_{2nl}^L = \sqrt{2\mu(U_0^L - E_{nl}^L)/\hbar^2}$ ,  $k_{1nl}^L = e^2\mu/\gamma_{1nl}^L\hbar^2$ ,  $k_{2nl}^L = e^2\mu/\gamma_{2nl}^L\hbar^2$ , а  $C_{1nl}^L$  и  $C_{2nl}^L$  – нормировочные коэффициенты. Следует отметить, что равенства нулю угловой волновой функции электрона на основании линзообразной области приводит к требованию равенства суммы  $l + |m|$  нечетному числу.

Проводя вычисления, аналогичные случаю эллипсоидальной КТ, для  $f_{lmm'}^L$  получим

$$f_{lmm'}^L = \alpha_L \left[ \frac{1}{2} \frac{C_{l,m}(l+m)!!}{2^{l-m} \left(\frac{l-m-1}{2}\right)!} \right. \\ \left. \left( A_{l,m} C_{l+1,m} \frac{(l+m)!!}{(2l+2) \cdot \left(\frac{l-m+1}{2}\right)!} + B_{l,m} C_{l-1,m} \frac{(l+m-2)!!}{l \cdot \left(\frac{l-m-1}{2}\right)!} \right) \right] \delta_{mm'} \quad (24)$$

где  $A_{l,m} = \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{4(l+1)^2 - 1}}$ ,  $B_{l,m} = \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1}}$  и  $C_{l,m} = (-1)^m \sqrt{(2l+1) \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}$ ,  $a!!$  –

двойной факториал.

Как следует из (24), имеет место равенство  $f_{lmm}^L = f_{l,-m,-m}^L$ , следовательно, вырождение снимается частично, т. к. полярная симметрия задачи сохраняется и вырождение по знаку  $m$  остается. Для поправок к энергии основного ( $l=1$ ,  $m=0$ ) и первого возбужденного ( $l=2$ ,  $m=\pm 1$ ) состояний соответственно получим

$$\Delta E_{110}^L = \frac{1}{4} \alpha_L T_{11}^L, \quad (25)$$

$$\Delta E_{121}^L = \Delta E_{12-1}^L = \frac{1}{8} \alpha_L T_{12}^L.$$

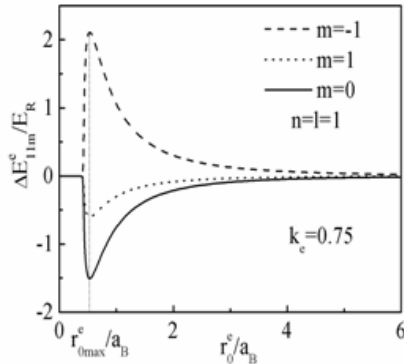


Рис. 3. Зависимость поправки  $\Delta E_{11m}^e$  от радиуса КТ при  $\alpha = 0.2$ ,  $\nu = 42.75$ .

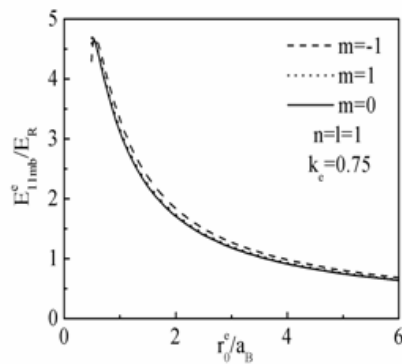


Рис. 4. Зависимость энергии связи  $E_{110}^e$  от радиуса при  $\alpha = 0.2$ ,  $\nu = 42.75$ .

**3. Обсуждение результатов.** Для проведения количественных оценок отметим, что численные расчеты сделаны на примере соединения  $GaAs / Ga_{1-x}Al_xAs$ , когда  $x = 0.3$ ,  $\mu = 0.067m_e$ ,  $U_0^{e,L} = 224.46 \text{ meV}$  и  $\varepsilon = 13.1$ , где  $m_e$  – масса свободного электрона. При этом вычисления проведены в единицах  $E_R = \frac{\hbar^2}{2\mu a_B^2}$  и  $a_B = \frac{\hbar^2 \varepsilon}{\mu e^2}$ . На рис. 3 и 6 представлены зависимости поправки энергии  $\Delta E_{11}$  для эллипсоидальной и линзообразной КТ от радиуса  $r_0$ . Как видно на рисунках, для больших значений радиуса  $\Delta E_{11}$  стремится к нулю. С уменьшением радиуса КТ поправка увеличивается и, достигнув своего максимального значения, резко убывает. Это объясняется тем, что при сравнительно больших радиусах частица локализована далеко от стенок КТ, вследствие чего слабо чувствует влияние границы КТ.

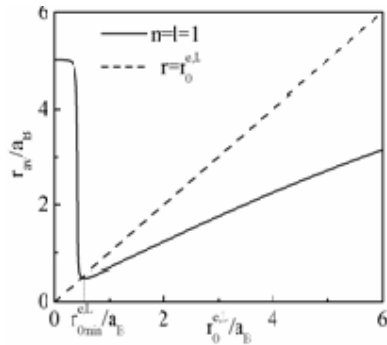


Рис. 5. Зависимость среднего значения координаты  $r$  от радиуса КТ.

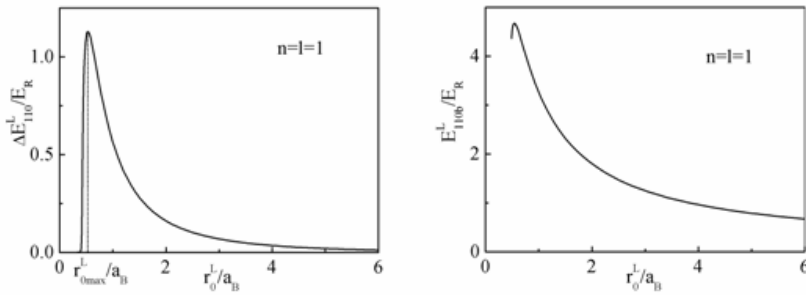


Рис. 6. Зависимость поправки  $\Delta E_{110}^L$  от радиуса КТ при  $\alpha = 0.2$ ,  $\nu = 42.75$ .

Рис.7. Зависимость энергии связи  $E_{1106}^L$  от радиуса КТ при  $\alpha = 0.2$ ,  $\nu = 42.75$ .

Поэтому поправка к энергии, обусловленная деформацией геометрической формы КТ, проявляется слабо. При меньших значениях радиуса вклад несферичности границы возрастает. Однако дальнейшее убывание радиуса приводит к выскакиванию частицы из КТ и ее локализации в окружающей КТ среде (область  $r < r_{0\max}$  на рис. 5). Естественно, при локализации частицы вне квантовой точки несферичность границы слабее влияет на энергию НЗ.

Энергия связи электрона определяется как разность  $E_{nlmb}^{e,L} = \tilde{E}_{nlm}^{e,L} - E_{nlm}^{e,L}$ , где  $\tilde{E}_{nlm}^{e,L}$  – энергия электрона в эллипсоидальной, линзообразной КТ без примеси. На рис. 4 и 7 показаны зависимости энергии связи от радиуса КТ. Когда радиус увеличивается, энергия связи уменьшается и постепенно стремится к энергии связи примеси в массивном образце. Когда радиус уменьшается, энергия связи доходит до своего максимума и начинает резко убывать. При этом энергия связи достигает своего максимума, когда электрон находится на ближайшем расстоянии от примеси (когда  $r = r_{0\min}^{e,L}$ , см. рис.5).

<sup>1</sup> Российско-Армянский (Славянский) университет

<sup>2</sup> Ереванский государственный медицинский университет

### **Յ. Գ. Գրիգորյան, Լ. Ս. Պետրոսյան, академик Э. М. Казарян**

#### **Примесные состояния в эллипсоидальных и линзообразных квантовых точках с конечным ограничивающим потенциалом**

Исследованы примесные состояния в эллипсоидальных и линзообразных квантовых точках с конечным ограничивающим потенциалом. Показано, что в эллипсоидальной КТ энергия связи в зависимости от радиуса сферы имеет максимум. Этот максимум соответствует тому значению радиуса, при котором электрон находится на ближайшем расстоянии от примеси. Тот же результат получен и для линзообразной КТ. Получены также зависимости энергетических поправок к энергии сферической и полусферической КТ соответственно от радиуса сферы и полусферы.

### **Չ. Հ. Գրիգորյան, Լ. Ս. Պետրոսյան, ակադեմիկոս Է. Մ. Ղազարյան**

#### **Խառնուրդային վիճակները վերջավոր սահմանափակող պոտենցիալով էլիպսոարդային և ոսպնյակաձև քվանտային կետերում**

Դիտարկված են խառնուրդային վիճակները վերջավոր սահմանափակող պոտենցիալով էլիպսարդային և ոսպնյակաձև քվանտային կետերում: Ցույց է տրված, որ էլիպսարդային քվանտային կետում էլեկտրոնի կապի էներգիան, կախված սֆերայի շառավղից, ունի մաքսիմում: Վերջինս համապատասխանում է շառավղի այն արժեքին, որի դեպքում էլեկտրոնը ամենամոտն է խառնուրդին: Նույն արդյունքն է ստացվել նաև ոսպնյակաձև քվանտային կետի համար: Պատկերված են նաև գնդային և կիսա-



գնդային քվանտային կետերի էներգիական ուղղումների կախվածությունները համապատասխանաբար գնդի և կիսագնդի շառավիղներից:

**Z. H. Grigoryan, L. S. Petrosyan, academician E. M. Kazaryan**

### **Impurity States in Ellipsoidal and Lens Shaped Quantum Dots with Finite Confinement Potential**

Impurity states in ellipsoidal and lens shaped quantum dots (QD) with finite confinement potential are investigated. It is shown that in the ellipsoidal QD the binding energy has its maximum depending on sphere radius. This maximum corresponds to the value of the radius, at which electron is at the nearest distance from impurity. The same result was obtained for the lens shaped QD. The corrections to the electron energy in the spherical and semispherical QD depending correspondingly on the sphere and semi sphere radius were also obtained.

#### **Литература**

1. *Anikeeva P., Halpert J., Bawendi M., Bulovic V.* - Nano Letters. 2009. V. 9 (7). P. 2532.
2. *Wilk A., Kovsh A. R., Mikhrin S. S., Chaix C., Novikov I. I., Maximov M. V., Shernyakov Yu. M., Ustinov V. M., Ledentsov N. N.* - Journal of Crystal Growth. 2005. V. 278. P. 338.
3. *Arregui F. J.* Sensor Based on Nanostructure Materials. Springer. 2010.
4. *Hayrapetyan D. B., Kazaryan E. M., Tevosyan H. Kh.* - Superlattices and Microstructures. *H. Kh. V H. Kh.* 2013. V. 64. P. 204.
5. *Dvoyan K. G., Kazaryan E. M., Petrosyan L. S.* – Physica E. 2005. V. 28. P. 333.
6. *Hayrapetyan D. B., Dvoyan K. G., Kazaryan E. M.* - Journal of Contemporary Physics. 2007. V. 42. P. 151.
7. *Hayrapetyan D. B., Kazaryan E. M., Tevosyan H. Kh.* – Physica E. 2012. V. 46. P. 274.
8. *Pelucchi E., Baier M., Ducommun Y., Watanabe S., Kapon E.* - Phys. stat. sol. (b). 2003. V. 238. P. 233.
9. *Rodriguez A., Giner C., Ulloa S., Antuna J.* - Phys. Rev. B. 2001. V. 63. P. 125319.
10. *Grigoryan Z. H., Petrosyan L.S., Kazaryan E. M.* - Electronic states in quantum lens with semifinite confinement potential // Conference ICSMN-2013, May 24-26.
11. *Liao X., Zou J., Duan X., Cockayne D., Leon R., Lobo C.* - Phys. Rev. B. 1998. V. 58. R4235.
12. *Barati M., Rezaei G., Vahdani M. R. K.* - Phys. stat. sol. (b). 2007. V. 244 P. 2605.
13. *Григорян З. Г.* - Доклады НАН РА. 2014 V. 114. N 2. P. 116.
14. *Lili He, Wenfang Xie.* - Superlattices and Microstructures. 2013. V. 47. P. 266.

15. *Hatice Taş, Mehmet Şahin.* - J. Appl. Phys. 2012. V. 111. P. 083702.
16. *Grigoryan Z. H., Kazaryan E. M., Petrosyan L. S.* – 2014. Physica E. V. 61. P. 53.
17. *Меликян А.О., Минасян Г.Р.* - Вестник РАУ. 2012. V. 1. P. 77.
18. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* - Квантовая механика. М. Наука. 1989.