**Физика**

УДК 621.315

**Д.Г. Геворгян1, академик Э.М. Казарян1,**

*1Российско-Армянский (Славянский) университет*

**ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ЛИНЗООБРАЗНОЙ КВАНТОВОЙ**

(Представлено \_\_.\_\_.2025)

**Введение.** Развитие новейших технологий роста, таких как метод Странски-Крастанова, молекулярно-лучевая эпитаксия и др., сделали возможным выращивание высококачественных квантовых точек (КТ) различных форм и размеров [1-5]. В последние годы появилось много теоретических и экспериментальных работ, где рассмотрены эллипсоидальные, пирамидальные, цилиндрические и линзообразные КТ [6-8]. В результате размерного квантования физические свойства носителей заряда (НЗ) в таких структурах сильно зависят от внешней формы объекта. В ряде работ было показано, что даже малое изменение внешней геометрической формы КТ сильно влияет на спектр НЗ в таких структурах [9,10].

В настоящее время интенсивно исследуются полупроводниковые наноструктуры, схожие со структурами типа . Во время роста КТ в результате диффузии формирующийся ограничивающий потенциал в большинстве случаев с большой точностью аппроксимируется параболическим потенциалом. Однако эффективный параболический потенциал может возникнуть в КТ также в силу особенности ее внешней формы [11]. Исследование цилиндрических КТ с тонким серповидным сечением дает возможность моделирования более реалистичных структур. Обычно во время роста КТ вследствие неизбежного явления диффузии формируется слой между материалом цилиндрической КТ и полупроводниковой матрицей. Этот новый слой значительно влияет на распределение квантовых уровней в цилиндрической КТ.

В настоящей работе рассмотрены электронные состояния в цилиндрической КТ с тонким серповидным сечением, ограничивающий потенциал которого для нижних уровней математически аппроксимирован одномерным потенциалом с переменной шириной. Работа выполнена в рамках государственной целевой программы РА “Полупроводниковая наноэлектроника” и гранта ANSEF PS-nano #1301.

**Теория.** Геометрия линзообразной квантовой точки моделируется цилиндрически симметричным полуэллипсоидом, представленным на рис. 1.

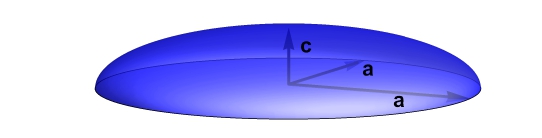
­­Потенциал частицы в такой КТ задается как

Рисунок 1: Схематическое представление полуэллипсоида с полуосями a, a и c

где и — большие и малая полуоси полуэллипсоида, и выполняется условие . Гамильтониан частицы в этой КТ в цилиндрических координатах имеет вид:

Если выразить расстояние в единицах эффективного Бора радиуса , где — диэлектрическая проницаемость, а энергию в единицах эффективной энергии Ридберга , то получим более простое выражение для оператора Гамильтона:

Из формы КТ и условия следует, что движение частицы по направлению происходит быстрее чем в плоскости , что позволяет использовать адиабатическое приближение. В рамках этого приближения гамильтониан частицы можно разложить на две компоненты:

где — медленная часть, а — быстрая. Решение стационарного уравнения Шредингера можно искать в виде

При фиксированном значении быструю подсистему можно представить в виде потенциальной ямы с эффективной шириной

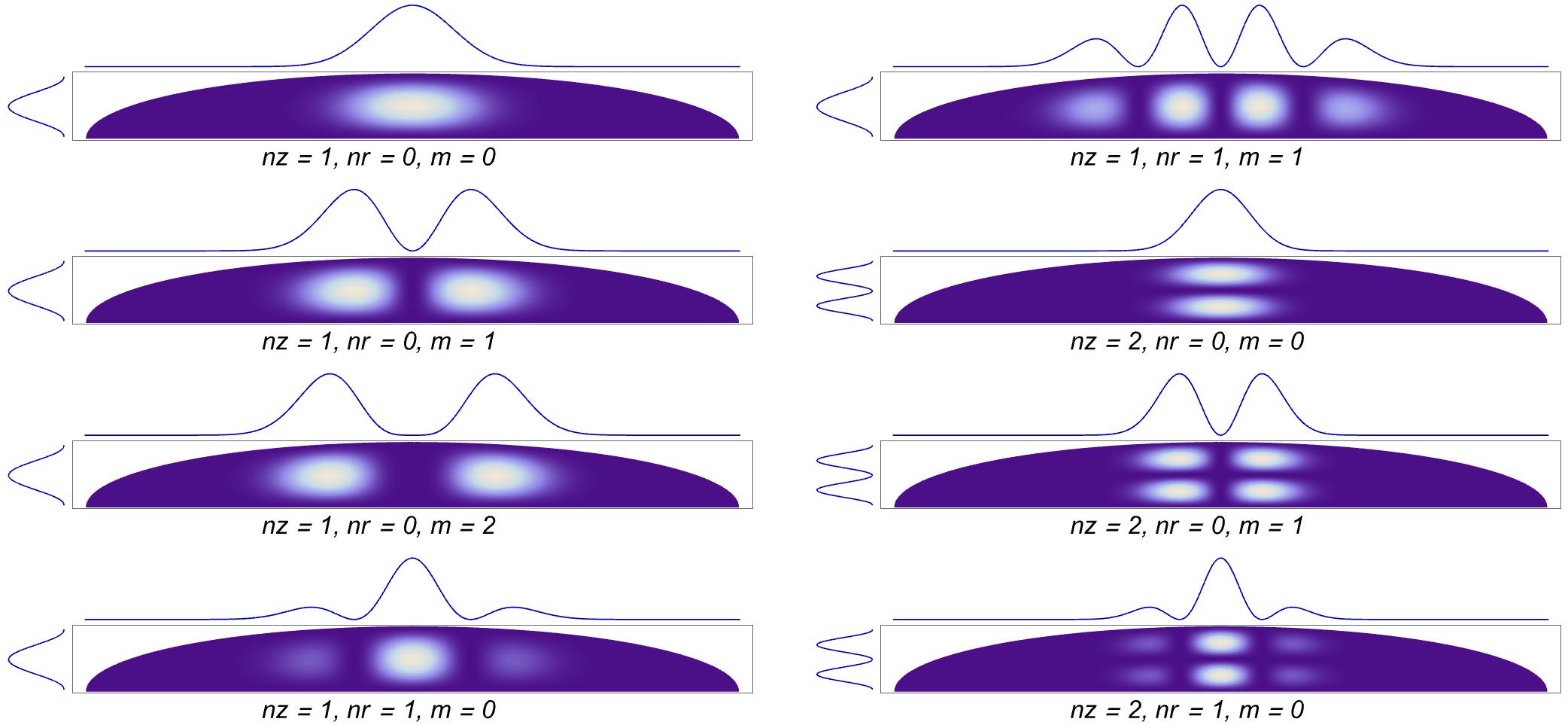
и решение уравнения Шрёдингера даёт

где — квантовое число быстрой подсистемы. Здесь можно разложить в ряд Тейлора следующим образом:

где и . Подставляя в уравнение медленной подсистемы как эффективный потенциал, получаем задачу двумерного гармонического осциллятора. Таким образом, — радиальная компонента решения этой задачи, которая задается следующим выражением:

где и — радиальное и магнитное квантовые числа, а — нормировочный коэффициент, равный

А энергетический спектр системы имеет вид:



**Теория.** Рассмотрим непроницаемую цилиндрическую КТ с тонким серповидным сечением (см. рис.1,а). Потенциальная энергия электрона внутри цилиндрической КТ запишется в виде



где  ─ радиусы двух окружностей сечения соответственно,  ─ высота цилиндра, ,  ─ высоты сегментов сечения соответственно,  ─ точка пересечения окружностей с осью  (см. рис.1,б).

Из вида формы сечения цилиндрической КТ следует, что движение частицы в направлении  происходит быстрее, чем в направлении , что в свою очередь позволяет применить адиабатическое приближение. Гамильтониан системы в этом случае запишется в виде

. (1)

В безразмерных величинах его можно представить в виде суммы операторов “быстрой” , “медленной”  подсистем и оператора  по направлению :

, (2)

где

 (3)

и введены следующие обозначения: , , , ,  ─ эффективная энергия ридберга,  ─ боровский радиус электрона,  ─ эффективная масса электрона,  ─ диэлектрическая проницаемость среды. Волновую функцию ищем в виде произведения

. (4)

Как результат симметрии цилиндрической КТ здесь имеет место частичное разделение переменных. Разделяя переменные, для направления  получаем уравнение

 (5)

решение которого задается в виде, а для энергии имеем

, (6)

где ─ квантовое число.

При фиксированном значении координаты  “медленной” подсистемы движение частицы локализовано в одномерной потенциальной яме с эффективной переменной шириной :

, (7)

, (8)

где  максимальное значение высоты сегмента серповидного сечения.

Уравнение Шредингера “быстрой” подсистемы в безразмерных величинах запишется в форме

. (9)

После несложных преобразований получим следующие выражения для волновой функции и энергии электрона, соответственно:

 (10)

, (11)

где ─ квантовое число “быстрой” подсистемы. Здесь получен следующий интересный результат: амплитуды волновых функций электрона имеют осцилляционную зависимость от геометрических параметров сечения КТ. Это означает, что плотность вероятности локализации носителя заряда проявляет осцилляционное поведение в периферийных областях тонкого серповидного сечения. Следует отметить, что при граничном переходе  () сечение цилиндрической КТ из серповидного превращается в обыкновенный тонкий сегмент окружности, для которого волновая функция (10) принимает известный вид [6] . При формальном переходе  () в выражении (10) сечение превращается в двойной сегмент окружности, а для волновой функции получаем выражение [14]

. (12)

В этих двух случаях осцилляционная зависимость амплитуд волновых функций электрона от геометрических параметров сечения КТ отсутствует. Иначе говоря, осцилляционная зависимость возникает в результате нарушения симметрии сечения цилиндрической КТ. При восстановлении же симметрии, как и следовало ожидать, осцилляционная зависимость исчезает.

***Параболическая аппроксимация.*** Как следует из адиабатического приближения, потенциальная энергия “медленной” подсистемы формируется под влиянием размерного квантования (РК) стенок одномерной потенциальной ямы с эффективной переменной шириной . Иными словами, потенциал формируется под влиянием серповидной геометрии сечения КТ. Считая, что для нижних уровней спектра частица в основном локализована в промежутке  (в геометрическом центре серповидного сечения), для энергии “быстрой” подсистемы приближенно получим

, (13)

где

. (14)

Выражение (13) является неким эффективным потенциалом, входящим в уравнение Шредингера “медленной” подсистемы

. (15)

Решая уравнение (15), окончательно для волновой функции и энергии электрона получим:

, (16)

 (17)

где  ─ полиномы Эрмита,  ─ осцилляторное квантовое число.

***Аппроксимация модифицированным потенциалом Пешля***−***Теллера.*** Как было отмечено выше, адиабатическое приближение применимо только для нижних уровней энергетического спектра. Формируемый параболический потенциал на основе разложения энергии “быстрой” подсистемы в ряд Тейлора приводит к образованию эквидистантных семейств энергетического спектра. Следует отметить, что каждый уровень “быстрой” подсистемы обладает собственным эквидистантным семейством уровней, где величины межуровневых расстояний каждого семейства зависят от квантового числа “быстрой” подсистемы. В действитель­ности, однако, эквидистантность спектра реализуется только для нижних двух-трех семейств энергетических уровней. Очевидно, что с ростом квантового числа “быстрой” подсистемы эквидистантность уровней нарушается. Для более успешной и реалистичной аппроксимации формируемого одномерного эффективного потенциала нами предложено использование модифицированного потенциала Пешля−Теллера (см. рис.2) [12]. В безразмерных величинах потенциал запишется в виде

, (18)

где  и  параметры, зависящие от квантового числа  “быстрой” подсистемы, которые, соответственно, описывают глубину и ширину образующейся квантовой ямы. Выбор модифицированного потенциала Пешля-Теллера обусловлен тем, что при малых значениях координаты  ряд Тейлора выражения (18) становится параболическим и согласуется с выражением (13). С другой стороны, с ростом координаты  будет увеличиваться разность ходов параболического потенциала и модифицированного потенциала Пешля−Теллера. Это обстоятельство позволит учитывать нарушение эквидистантности семейств энергетических уровней “медленной” подсистемы.

Далее, решая уравнение Шредингера “медленной” подсистемы с модифицированным потенциалом Пешля-Теллера

 (19)

и вводя обозначение

, (20)

получим уравнение [12]

. (21)

После некоторых несложных преобразований для волновых функций и энергетического спектра частицы получим [13]

, (22)

, (23)

где введено обозначение ,  ─ нормировочная постоянная,  ─ гипергеометрическая функция. Переходя на размерные величины, окончательно для энергии частицы запишем.

, (24)

где введены обозначения  и . Следует отметить, что при малых значениях координаты  потенциал (18) преобразуется к виду

. (25)

Дальнейшее решение уравнения Шредингера “медленной” подсистемы с потенциалом (25) аналогичен вышеизложенному случаю параболического потенциала. В этом случае эквидистантный энергетический спектр НЗ получается в виде

, (26)

который превосходно согласуется с результатом (17). Отметим также, что для нижних уровней спектр частицы получается эквидистантным, если в формуле (24) совершить предельный переход , который соответствует модели бесконечно глубокой потенциальной ямы (см. рис. 5).

**Обсуждение результатов.** Как видно из полученных результатов (см. формулы (17) и (26)), энергетический спектр НЗ в цилиндрической КТ с тонким серповидным сечением является эквидистантным, а зависимость энергии частицы от геометрических параметров КТ носит корневой характер. Точнее, каждый уровень “быстрой” подсистемы обладает собственным эквидистантным семейством уровней, где величины межуровневых расстояний каждого семейства зависят от квантового числа “быстрой” подсистемы. Отметим, что спектр НЗ получается эквидистантным и в случае перехода  [6]. Однако в случае, когда , получается редкая осцилляционная зависимость амплитуды волновых функций эффективного одномерного движения от геометрических параметров серповидного сечения (см. формулу (10)). Как было отмечено выше, эта зависимость является следствием нарушения симметрии сегмента сечения цилиндрической КТ, которая в свою очередь, приводит к осцилляционному поведению плотности вероятности локализации НЗ в периферийных областях тонкого серповидного сечения. Следует отметить также, что аппроксимация эффективной одномерной энергии модифицированным потенциалом Пешля-Теллера позволяет учитывать нарушение эквидистантности при более высоких значениях энергии. Как видно из рис.2, при малых значениях координаты  формируемый одномерный эффективный потенциал отлично аппроксимируется модифицированным потенциалом Пешля-Теллера. С увеличением  разность ходов реального и аппроксимируемых потенциалов становятся наглядной как в случае модифицированного потенциала Пешля-Теллера, так и в случае параболического потенциала.

На рис.3 приведены зависимости энергетических уровней первого эквидистантного семейства спектра НЗ в цилиндрической квантовой точке с серповидным сечением от высоты  малого сегмента сечения для двух случаев аппроксимации одномерного потенциала. Иначе говоря, сравнены результаты, полученные в формулах (17) и (26). Как видно из рисунка, в обоих случаях энергетические уровни НЗ эквидистантны, потому что при малых значениях координаты  разложение модифицированного потенциала Пешля-Теллера является квадратическим и почти совпадает с параболическим потенциалом. Однако эквидистантные межуровневые расстояния этих двух случаев отличаются. Так, при значениях геометрических параметров КТ ,  и  в чисто параболическом случае для межуровневых расстояний первого семейства имеем , тогда как во втором случае получается . Увеличение  приводит к уменьшению ширины серповидного сечения цилиндрической квантовой точки, что в свою очередь приводит к росту энергии НЗ из-за увеличения вклада РК. Однако, в случае применения разложения модифицированного потенциала Пешля-Теллера энергетические уровни располагаются выше, чем в случае применения чисто параболического потенциала, и с увеличением  их разность увеличивается. Это объясняется вкладом РК в энергию частицы. Как видно из рис.2, аппроксимированный модифицированный потенциал Пешля-Теллера в зависимости от координаты  растет быстрее параболического потенциала. Это означает, что действие РК стенок КТ на частицу в первом случае проявляется сильнее, чем во втором случае, что и приводит к вышеупомянутому поведению.

На рис.4. приведены зависимости первых трех уровней энергии частицы в цилиндрической КТ с серповидным сечением от высоты  малого сегмента сечения в случае реализации модифицированного потенциала Пешля-Теллера. Как видно из графиков, при реализации этой аппроксимации энергетические уровни частицы уже не эквидистантны (см. формулу (23)). Как было отмечено выше, потенциал Пешля-Теллера позволяет учитывать непараболичность хода образуемого потенциала, что наглядно проиллюстрировано на рисунке.

Наконец на рис. 5 приведены зависимости первого эквидистантного семейства энергии НЗ в цилиндрической КТ с тонким серповидным сечением от параметра глубины ямы  для случаев реализации модифицированного параболического потенциала и модифицированного потенциала Пешля-Теллера. Как было отмечено выше, для нижних уровней спектр частицы получается эквидистантным, если в формуле (24) совершить предельный переход , который соответствует модели бесконечно глубокой потенциальной ямы (см. рис. 5). Как видно из рисунка, с увеличением параметра  разность энергий, соответствующих двум случаям, стремится к нулю и кривые сливаются. Иными словами, при достаточной глубине потенциальной ямы формула энергии (23) переходит в формулу (26) и спектр НЗ становится эквидистантным.

**Заключение.** В настоящей работе мы теоретически выявили, что энергетический спектр частицы в цилиндрической КТ с серповидным сечением является эквидистантным для нижних уровней спектра, а зависимость энергии частицы от геометрических параметров КТ носит корневой характер. Нами была выявлена редкая (осцилляционная) зависимость амплитуд волновых функций эффективного одномерного движения от геометрических параметров сечения цилиндрической КТ, которая объясняется нарушением геометрической симметрии задачи. Формируемый потенциал эффективного одномерного движения был успешно аппроксимирован модифицированным потенциалом Пешля-Теллера, который позволяет учитывать разность хода формируемого реального потенциала от параболического. Влияние разложенного в ряд Тейлора модифицированного потенциала Пешля-Теллера на нижние уровни спектра НЗ (при локализации частицы в геометрическом центре поперечного сечения цилиндрической КТ) сравнен со случаем реализации чисто параболического потенциала.

**Литература**

1. Казарян Э.М., Петросян С.Г. Физические основы полупроводниковой наноэлектроники. Ереван, изд. РАУ, 2005.
2. Petroff P.M., Mederios-Riberio G. Mater. [Electronic states in a quantum lens](http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.63.125319) . Res. Bull., V. 21, P. 50-56, (1996).
3. Zangwill A. Physics at surfaces. Cambridge University Press, Cambridge, 1988.
4. Wojs A., Hawrylak P., Fafard S., Jacak L. [Electronic structure of vertically stacked self-assembled quantum disks](http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.63.195311). Phys. Rev. B V. 54, P. 5604, (2001).
5. Li S.-S., Xia J.-B. [Electronic structures of GaAs/AlxGa1-xAs quantum double rings](http://www.springerlink.com/index/X20HQ4N36723T736.pdf). Nanoscale Res Lett. 2006. P. 1:167-171.
6. Chanchapanyan A. Light absorption in a cylindrical quantum dot with lens-shaped creoss-section. Proceedings of the Fifth International Conference “Semiconductor Micro- and Nanoelectronics”. Aghveran, Armenia, September 16-18, 2005, P.189-192.
7. Dvoyan K. Light absorption in ellipsoidal quantum lens. Proc. of Semicond. Micro-and Nanoelectronics the Fifth national conference Aghveran, Armenia, September 16-18, 2005, P. 169-172.
8. Trallero-Herrero C., Trallero-Giner C., Ulloa E., Perez-Alvarez R. Phys. Rev. E, 2001. V. 64, P. 056237-1-7.
9. Dvoyan K.G., Kazaryan E.M., Petrosyan L.S. Electronic states in quantum dots with ellipsoidal symmetry. Physica E, 2005. V. 28, P. 333-338.
10. Lew Yan Voon L.C., Willatzen M. Confined states in parabolic cylinder quantum dots. Jour. of Phys.: Condens. Matter, 2002. V. 14, P. 13667-13671.
11. Maksym P.A., Chakraborty T. Quantum dots in a magnetic field: role of electron-electron interaction. Phys. Rev. Lett. 1990. V. 65, P. 108-111.
12. Flügge S. Practical Quantum Mechanics. Springer-Werlag, 1971.
13. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика, Т. 3. М. Наука, 1974.
14. Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И. Задачи по квантовой механике. М. Наука, 1981.

**Д.Б. Айрапетян1,2, К. Г. Двоян1, академик Э.М. Казарян1,**

**А.А. Чанчапанян1**

*1Российско-Армянский (Славянский) университет*

*2Государственный инженерный университет Армении*

**ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ С ТОНКИМ СЕРПОВИДНЫМ СЕЧЕНИЕМ С МОДИФИЦИРОВАННЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ ПЕШЛЯ-ТЕЛЛЕРА**

В рамках адиабатического приближения исследованы электронные состояния в цилиндрической квантовой точке (КТ) с тонким серповидным сечением. Получены аналитические выражения для волновых функций и энергетического спектра электрона. Выявлена осцилляционная зависимость амплитуд волновых функций одномерной “быстрой” подсистемы от геометрических параметров цилиндрической КТ с тонким серповидным сечением. Для “медленной” подсистемы рассмотрены случаи, как параболического эффективного потенциала, так и эффективного модифицированного потенциала Пешля─Теллера. Показано, что для нижних уровней спектр электрона в обоих случаях является эквидистантным, а зависимость энергии частицы от геометрических параметров КТ носит корневой характер.

Ключевые слова: *модифицированный потенциал Пешля*─*Теллера, цилиндрическая квантовая точка, серповидное сечение.*