

## ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ЕЛЕКТРОНА У НЕСФЕРИЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧКАХ

На основі варіаційного методу з варіаційними параметрами в операторній частині гамільтоніана розраховано електронний спектр у квантовій точці GaAs, яка має форму зрізаної піраміди, розміщеної у середовищі  $\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$ . Розрахунки виконувались двома методами. Перший метод полягав у наближенні квантової точки апроксимаційною сферою, радіус якої використовувався як варіаційний параметр. Другий метод – наближення апроксимаційним циліндром, варіаційними параметрами при цьому виступають радіус та висота циліндра. Встановлена залежність енергії основного стану електрона від співвідношень розмірів квантової точки.

The electron spectrum in GaAs quantum dot (having the cutted pyramid shape) embedded into  $\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$  medium is calculated on the base of the variation method with variation parameters in the Hamiltonian operator part. The investigation is performed using two methods. The first one is the approximation of the quantum dot by sphere with the radius serving as variational parameter. The second one is the approximation of QD by the cylinder with radius and height as the variational parameters. The energy of the electron ground state as function of ratios between quantum dot sizes is obtained.

### Вступ

На даний час запропоновано декілька методів отримання квантових точок. Метод молекулярно-променевої епітаксії (molecular-beam epitaxy) дозволяє отримувати складні квантові точки сферичної форми [1,2]. Методом поперечного протравлення квантових дрітків одержували квантові точки циліндричної форми. У роботі [3] самоузгодженим методом росту квантових точок на напівпровідникових підкладках діставали впорядковані масиви квантових точок, форма яких була близька до зрізаної піраміди з квадратною основою.

Зрозуміло, що теоретичним дослідженням найкраще піддаються квантові точки сферичної, циліндричної та кубічної симетрії. У випадку сферичних квантових точок при розрахунку електронного спектра отримується точний розв'язок рівняння Шредінгера як для безмежно глибокої потенціальної ями, так і для потенціальної ями скінченної глибини. Для циліндричних квантових точок, рівняння Шредінгера має точний розв'язок лише у випадку безмежно глибокої потенціальної ями в напрямку осі циліндра. А для квантових точок складнішої форми (піраміди, еліпси та ін.) існують лише наближені методи знаходження енергетичного спектра. Ось чому теорія спектрів квазічастинок (електронів, дірок, екситонів, фононів) у квантових ямах розвинута, в

основному, для просторово-обмежених гетеросистем сферичної, циліндричної та прямокутної форм. У більшості робіт використовувалась модель діелектричного континуума для контактуючих середовищ, а розрахунок виконувався в наближенні ефективних мас для квазічастинок. Результати досліджень екситонних спектрів у складних сферичних гетеросистемах [1] доводять можливість застосування цих методів у квантових точках, розміри яких досягають 30-40 Å.

Теоретичні дослідження квантових точок несферичної симетрії виконуються різними наближеними методами [3, 4]. Одні з них вирізняються великою складністю, інші – недостатньою точністю. При цьому автори користуються варіаційним методом Рітца та наближенням еквівалентною за об'ємом сферою. Останній метод найпростіший, але дуже грубий. Складність варіаційного методу Рітца полягає не стільки в громіздкості математичних формул, скільки у правильному виборі варіаційних функцій, що описують основний та збуджені енергетичні рівні.

Одним із можливих способів позитивного розв'язання цієї проблеми є застосування варіаційного методу Бете, зміст якого полягає в тому, що варіаційний параметр уводиться не у хвильову функцію, а в оператор Гамільтона системи. При цьому необхідно в гамільтоніані виділити основну

його частину  $H_0$ , для якої відомі точні розв'язки рівняння Шредінгера. Тоді наближений розв'язок рівняння Шредінгера знаходиться як сума власних значень основної частини гамільтоніана і поправок, розрахованих на власних функціях гамільтоніана  $H_0$ .

У даній роботі на основі варіаційного методу з варіаційними параметрами в операторній частині гамільтоніана розраховано електронний спектр у квантовій точці GaAs, яка має форму зрізаної піраміди, поміщеної в середовище GaAl<sub>0,2</sub>As<sub>0,8</sub>. При цьому потенціальна яма, утворена квантовою точкою, апроксимується сферичною ямою, радіус якої виступає як варіаційний параметр. Обчислення проводились для структур GaAs/GaAl<sub>0,2</sub>As<sub>0,8</sub> різних розмірів. Проаналізована залежність енергетичних рівнів від співвідношень розмірів зрізаної піраміди.

### Гамільтоніан задачі та розв'язок рівняння Шредінгера у нульовому наближенні

Розглянемо наногетеросистему, яка складається з напівпровідникового нанокристала GaAs, що має форму зрізаної піраміди висотою  $h$  і квадратами стороною  $a$  в нижній основі та стороною  $b$  у верхній основі. Квантова точка поміщена в інше напівпровідникове масивне середовище GaAl<sub>0,2</sub>As<sub>0,8</sub>. Якщо за початок відліку енергії прийняти енергію дна зони провідності кристала GaAs, то для електрона створюються потенціальна яма

$$U(\vec{r}) = \begin{cases} -V_0, & \text{в межах КТ,} \\ 0, & \text{зовні КТ.} \end{cases} \quad (1)$$

Отже, необхідно розв'язати задачу про енергетичний спектр та хвильові функції квазічастинки в потенціальній ямі (1).

Рівняння Шредінгера має вигляд

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{m(\vec{r})} \vec{\nabla} + U(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}), \quad (2)$$

де

$$m(\vec{r}) = \begin{cases} m_0, & \text{в межах КТ,} \\ m_1, & \text{зовні КТ.} \end{cases} \quad (3)$$

Рівняння (2) з потенціалом (1) і масами (3) точно не розв'язується. Тому, використовуючи варіаційний метод Бете, апроксимуємо квантову точку сферою радіуса  $r_0$ , який відіграватиме роль варіаційного параметра.

Потенціал апроксимації записується у вигляді

$$V_s(r) = \begin{cases} -V_0 & 0 \leq r \leq r_0, \\ 0, & r_0 \leq r \leq \infty, \end{cases} \quad (4)$$

і апроксимована маса

$$m_s(r) = \begin{cases} m_0, & 0 \leq r \leq r_0, \\ m_1, & r_0 \leq r \leq \infty. \end{cases} \quad (5)$$

Гамільтоніан системи можна подати у вигляді

$$H = H_0 + \Delta H, \quad (6)$$

де

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{m_s(r)} \vec{\nabla} + V_s(r), \quad (7)$$

гамільтоніан електрона в апроксимаційній сферичній гетеросистемі,

$$\Delta H = -\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{m(\vec{r})} \vec{\nabla} + \frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{m_s(r)} \vec{\nabla} + U(\vec{r}) - V_s(r) \quad (8)$$

– гамільтоніан збурення.

Отже, за основну частину гамільтоніана  $\hat{H}_0$  вибрано гамільтоніан квазічастинки у сферичній потенціальній ямі певного радіуса  $r_0$ , значення якого буде визначатись, згідно з варіаційним методом Бете, з мінімуму функціонала повної енергії.

Рівняння Шредінгера з  $\hat{H}_0$  розв'язується точно в сферичній системі координат  $(r, \vartheta, \varphi)$ .

$$\hat{H}_0 \Psi(r, \vartheta, \varphi) = \varepsilon_{nl} \Psi(r, \vartheta, \varphi), \quad (9)$$

Так як рівняння (9) має сферично-симетричну форму, його розв'язок слід шукати у вигляді

$$\Psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (10)$$

Радіальна частина матиме вигляд

$$R_{nl}(r) = \begin{cases} R_{nl}^{(0)}(r) = A_0 j_\ell(k_n r), & r \leq r_0, \\ R_{nl}^{(1)}(r) = A_1 h_\ell^{(+)}(i\chi_n r), & r > r_0, \end{cases} \quad (11)$$

де

$$\chi = \sqrt{\frac{2m_1(V_0 - E)}{\hbar^2}}, \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_0 E}. \quad (12)$$

На межі поділу середовищ  $r=r_0$  повинні виконуватись умови зшивки хвильової функції і потоку густини ймовірності

$$\begin{cases} R_{nl}^{(0)}(r_0) \Big|_{r=r_0} = R_{nl}^{(1)}(r_0) \Big|_{r=r_0}, \\ \frac{1}{m_0} \frac{\partial R_{nl}^{(0)}}{\partial r} \Big|_{r=r_0} = \frac{1}{m_1} \frac{\partial R_{nl}^{(1)}}{\partial r} \Big|_{r=r_0}. \end{cases} \quad (13)$$

Із системи (13) отримаємо дисперсійне рівняння для визначення енергетичного спектра квазічастинки

$$\frac{1}{m_0} \left[ \ell - k_n r_0 \frac{j_{\ell+1}(k_n r_0)}{j_{\ell}(k_n r_0)} \right] = \frac{1}{m_1} \left[ \ell - i\chi_n r_0 \frac{h_{\ell+1}^+(i\chi_n r_0)}{h_{\ell}^+(i\chi_n r_0)} \right]. \quad (14)$$

Зв'язок коефіцієнта  $A_1$  з  $A_0$  записується у вигляді

$$A_1 = A_0 \frac{j_{\ell}(k_n r_0)}{h_{\ell}^+(i\chi_n r_0)}. \quad (15)$$

У випадку, коли  $\ell=0$ , рівняння (14) матиме вигляд

$$1 + \chi_n r_0 - \frac{m_1}{m_0} (1 - k_n r_0 \operatorname{ctg} k_n r_0) = 0. \quad (16)$$

Радіальна частина хвильової функції для довільних  $\ell$  запишеться у вигляді

$$R_{n\ell}(r) = A_0 \begin{cases} j_{\ell}(k_n r), & 0 \leq r \leq r_0, \\ \frac{j_{\ell}(k_n r_0)}{h_{\ell}^+(i\chi_n r_0)} h_{\ell}^+(i\chi_n r), & r_0 \leq r \leq \infty. \end{cases} \quad (17)$$

Варіаційний параметр  $r_0$ , що міститься в дисперсійному рівнянні, знаходиться згідно з варіаційним методом Бете з умови мінімуму функціонала, побудованому з основного гамільтоніану  $\hat{H}_0$  та поправок  $\Delta H$ , усереднених на хвильових функціях (17).

### Розрахунок поправки на неферичність

Енергетичний спектр електрона в першому наближенні визначається як розв'язок "нульової" задачі, знайдений із дисперсійного рівняння (14), до якого додається поправка, отримана на хвильових функціях попереднього параграфу. Отже

$$E_{n\ell m}(r_0) = \varepsilon_{n\ell}(r_0) + \langle n\ell m | \Delta \hat{H} | n\ell m \rangle. \quad (18)$$

Поправку до основного гамільтоніану зручно записати у вигляді

$$\Delta \hat{H} = \Delta \hat{H}_0 + \Delta \hat{H}_1, \quad (19)$$

де  $\Delta \hat{H}_0 = T_0 + U_0$  – гамільтоніан, що діє на хвильову функцію в області простору всередині сфери радіуса  $r_0$ , але зовні квантової точки ( $\Omega_0$ ),

$\Delta \hat{H}_1 = T_1 + U_1$  – гамільтоніан, що діє на хвильову функцію в області простору зовні сфери радіуса  $r_0$ , але всередині квантової точки ( $\Omega_1$ ). З формули (8) отримаємо вигляд операторів  $\Delta \hat{H}_0$  та  $\Delta \hat{H}_1$

$$\Delta \hat{H}_0 = \Theta_0(\vec{r}) \left\{ m_0 \left( \frac{1}{m_1} - \frac{1}{m_0} \right) \times \right.$$

$$\left. \times \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \right] \left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) + V_0 \right\}, \quad (20)$$

$$\Delta \hat{H}_1 = \Theta_1(\vec{r}) \left\{ m_1 \left( \frac{1}{m_0} - \frac{1}{m_1} \right) \times \right.$$

$$\left. \times \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_1} \right] \left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) - V_0 \right\}, \quad (21)$$

де функції  $\Theta_0(\vec{r})$  і  $\Theta_1(\vec{r})$  визначають область дії відповідних операторів і мають вигляд

$$\Theta_{0(1)}(\vec{r}) = \begin{cases} 1, & \vec{r} \in \Omega_{0(1)}, \\ 0, & \vec{r} \notin \Omega_{0(1)}. \end{cases} \quad (22)$$

Оскільки хвильові функції (17) є власними функціями оператора  $\Delta \hat{H}$ , то

$$\Delta \hat{H}_0 R_{n\ell}^{(0)}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \Theta_0(\vec{r}) R_{n\ell}^{(0)}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \times$$

$$\times \left\{ m_0 \left( \frac{1}{m_1} - \frac{1}{m_0} \right) \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m_0} + V_0 \right\}, \quad (21)$$

$$\Delta \hat{H}_1 R_{n\ell}^{(1)}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \Theta_1(\vec{r}) \left\{ m_1 \left( \frac{1}{m_0} - \frac{1}{m_1} \right) \times \right.$$

$$\left. \times \left( -\frac{\hbar^2 \chi_n^2}{2m_1} \right) - V_0 \right\} R_{n\ell}^{(1)}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi). \quad (22)$$

Функціонал (18) після відповідних розрахунків перетвориться до вигляду

$$E_{n\ell m}(r_0) = \varepsilon_{n\ell} + \left\{ \left( 1 - \frac{m_0}{m_1} \right) \varepsilon_{n\ell} + \frac{m_0}{m_1} V_0 \right\} I_{n\ell m}^{(0)} +$$

$$+ \left\{ \left( 1 - \frac{m_1}{m_0} \right) \varepsilon_{n\ell} - V_0 \right\} I_{n\ell m}^{(1)}, \quad (23)$$

де введено наступні позначення

$$I_{n\ell m}^{(0)} = \iiint_{\Omega_0} \left| R_{n\ell}^{(0)}(r) \right|^2 \left| Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \right|^2 d\vec{r}, \quad (24)$$

$$I_{n\ell m}^{(1)} = \iiint_{\Omega_1} \left| R_{n\ell}^{(1)}(r) \right|^2 \left| Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \right|^2 d\vec{r}. \quad (25)$$

Області інтегрування зображено в перерізі на рис.1.

Інтегрування по областях  $\Omega_0$  та  $\Omega_1$  виконувалось на ЕОМ методом Монте-Карло.

### Апроксимація циліндричною квантовою ямою

Для порівняння розраховувалась енергія основного стану електрона в пірамідальній квантовій точці, використовуючи наближення апроксимаційним циліндром.

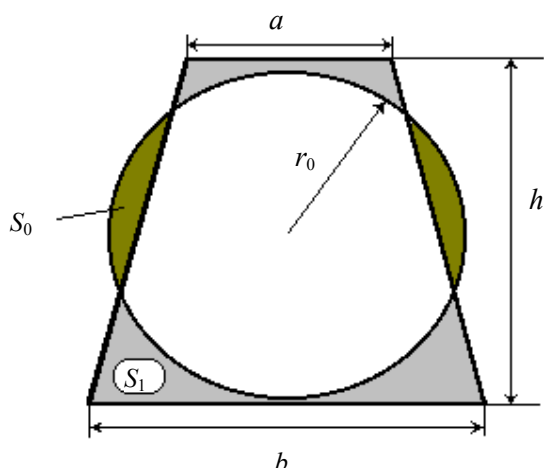


Рис.1. Схема областей інтегрування  $S_0$  та  $S_1$ .

Відомо, що рівняння Шредінгера для циліндричної квантової точки зі скінченною висотою потенціального бар'єра не має точного розв'язку. Але враховуючи те, що хвильова функція за межами квантової точки швидко затухає, то розділивши змінні  $\rho$  та  $z$ , з великою точністю хвильову функцію електрона можна записати так

$$\Psi_{n\rho m}(\rho, \varphi, z) = A\varphi(\rho)f(z), \quad (26)$$

де

$$f(z) = \begin{cases} \cos(k_{n_z} z), & n = 1, 3, 5, \dots, |z| < h, \\ \sin(k_{n_z} z), & n = 2, 4, 6, \dots, |z| < h, \\ \exp(\chi_{n_z} z), & |z| > h. \end{cases} \quad (27)$$

$$k_{n_z} = \sqrt{\frac{2m_0 E_z}{\hbar^2}}, \quad \chi = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu_1 (U_0 - E^0)},$$

$$\varphi(\rho) = \begin{cases} J_m(k_{n\rho} \rho), & \rho < \rho_0, \\ \frac{J_m(k_{n\rho} \rho_0)}{N_m(k_{n\rho} \rho_0)} N_m(k_{n\rho} \rho), & \rho > \rho_0. \end{cases} \quad (28)$$

Енергетичний спектр електрона в циліндричній квантовій точці має вигляд

$$E_{n\rho m} = \frac{\hbar^2}{2m_0} (k_{n_z}^2 + k_{n\rho m}^2), \quad (29)$$

де  $\chi_{nm}$  – нулі функцій Бесселя  $J_m(\chi_{nm}\rho)$ .

Для перевірки точності методу розрахунку енергії основного стану електрона у квантовій точці, що ґрунтується на апроксимації циліндричною квантовою точкою, виконано розрахунки найнижчого енергетичного рівня у сферичній квантовій точці і результати зіставлені з точними розв'язками сферично симетричної задачі, отриманими з рівняння (16). Виявився, повний збіг енергій у широкій області розмірів квантової точ-

ки, що підтвердило можливість застосування запропонованого метода для розрахунку енергетичного спектру у квантових точках низької симетрії.

### Аналіз отриманих результатів

На основі формул попередніх параграфів розраховано енергію основного стану електрона у квантовій точці GaAs, яка має форму зрізаної піраміди, розміщеної у середовищі  $\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$ . Параметри матеріалів наведені у таблиці 1. Результати розрахунків зображені на рис.2,3 суцільними лініями.

На рис.2 зображено залежність енергії основного стану електрона у квантовій точці GaAs/ $\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$  від співвідношення між сторонами квадратів нижньої та верхньої основ зрізаної піраміди. Як видно з рисунка, запропонованим методом розраховано енергію основного стану елек-

Таблиця 1. Параметри кристалів.

	$m_e(m_0)$	$a(\text{\AA})$	$V_e(\text{meV})$
GaAs	0,067	5,65	-145
$\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$	0,0836	5,65	0

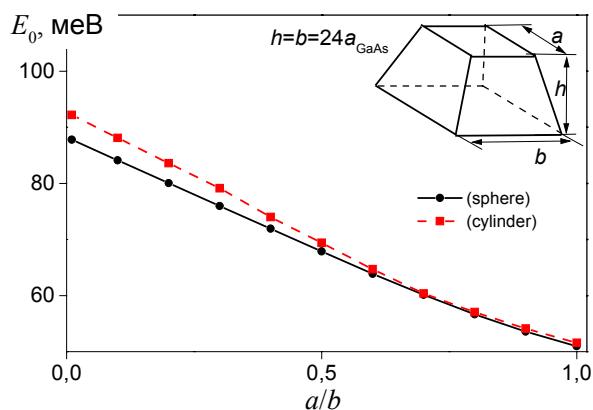


Рис.2. Залежність енергії основного стану електрона у квантовій точці GaAs/ $\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$  від співвідношення  $a/b$ .

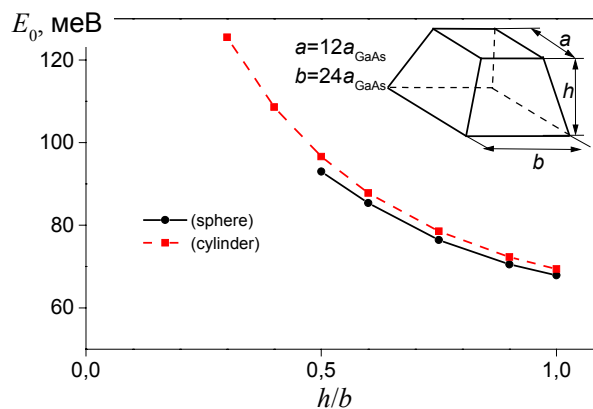


Рис.3. Залежність енергії основного стану електрона у квантовій точці GaAs/ $\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$  від співвідношення  $h/b$ .

трона для квантових точок від пірамідальної ( $a=0$ ) до кубічної ( $a=b$ ) форми. При цьому величина поправки у функціоналі (23) для випадку  $a=b$  виявилась значно меншою за поправку, розраховану для випадку  $a=0$ . Це зрозуміло з фізичних міркувань, оскільки у випадку кубічної форми квантової точки наближення апроксимаційною сферою краще, ніж у випадку пірамідальної форми квантової точки.

На рис.3. зображено залежність енергії основного стану електрона у квантовій точці GaAs/Al<sub>0,2</sub>Ga<sub>0,8</sub>As від співвідношення між висотою і стороною квадрата нижньої основи зрізаної піраміди. Виявилось, що для випадку плоских квантових точок ( $h/b < 0,5$ ) функціонал (23) не має мінімуму з зміною варіаційного параметра, отже, наближення таких квантових точок апроксимаційною сферою некоректне. Тому для такого випадку необхідно розраховувати енергетичний спектр квазічастинок наближенням відповідною циліндричною квантовою точкою.

Отже, варіаційний метод Бете дозволяє розраховувати енергетичні спектри квазічастинок у неферичних квантових точках. Запропонований підхід досить точно визначає енергію основного стану електрона в широкій області співвідношень розмірів пірамідальних квантових точок.

#### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Schooss D., Mews A., Eychmuller A., Weller H. Quantum dot quantum well CdS/HgS/CdS: theory and experiment // Phys. Rev. B - 1994. - II. - **49**, №24. - P.17072-17078.
2. Porteanu H.E., Lifshitz E., Pflughoefft M., Eychmuller A., Weller H. Optical properties of CdS/HgS/CdS quantum dot-quantum well structures // Pys.stat.sol.(b). - 2001.- **226**. - P. 219-232.
3. Degani M. Energy-momentum relation for polarons in quantum - well wires // Phys. Rev. B - 1989. - **40**, №17. - P. 11937-11939.
4. Le Goff S. and Stébé B. Influence of longitudinal and lateral confinements on excitons in cylindrical quantum dots of semiconductors // Phys.Rev. B. - 1993. - **47**, №3. - P.1383-1391.