

В.І. Бойчук, В.Б. Гольський, Р.І. Лукін

Дослідження енергетичного спектру і густини ймовірності перебування квазічастинки в двошаровому нанокристалі еліпсоїдальної форми

*Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,
Інститут фізики, математики та інформатики*

В роботі досліджено енергетичний спектр електрона в двошаровій квантовій точці сфероїдальної форми. Задачу розв'язано в наближенні нескінченно глибокої потенціальної ями. Досліджено густину ймовірності перебування квазічастинки в досліджуваній гетероструктурі. Обчислення проведено для структури скло / CdSe / скло.

Ключові слова: квантові точки, нанокристал, енергетичний спектр, сфероїдальна форма, ймовірність перебування.

Стаття постуила до редакції 22.09.2009; прийнята до друку 15.06.2010.

Вступ

Прогрес в дослідженні наноструктур дав можливість відкрити перспективи створення пристроїв типу одноелектронних транзисторів, елементів пам'яті та лазерів. Розміри сучасних об'єктів дослідження становлять нанометри. У таких областях необхідно враховувати ефекти розмірного квантування, бо фізичні властивості напівпровідникових систем починають залежати як від фізичних, так і геометричних параметрів.

Еліпсоїдальна форма КТ звертає до себе увагу дослідників [1 - 6] у зв'язку з тим, що за певних параметрів еліпсоїд можна розглядати як сферу чи як циліндр, а експериментально важко отримати нанокристали визначеної форми.

У наближенні нескінченної потенціальної ями знайдено енергетичний спектр зарядженої частинки та екситона, досліджено вплив поляризаційних ефектів на спектр квазічастинки [1 - 4]. У роботі [5] використано ортогональну квазісферичну систему координат, для дослідження КТ еліпсоїдальної форми з врахуванням реального розриву зон на межі середовищ. Отримані результати, однак можна використати лише для досить великої ступені сплюснутості (великого ексцентриситету). Врахування реального розриву зон на межі середовищ здійснено в роботі [6], де проведено аналіз впливу ступеня витягнутості на енергії електрона в еліпсоїдальній КТ. Досліджувались і дво-, три- та багатошарові сферичні гетероструктури [7 - 12]. Знайдено спектр і хвильові функції електронів

та поляризаційних фононів. Визначено потенціальну енергію взаємодії зарядженої частинки з поляризаційними зарядами меж поділу, досліджено також вплив перехідних шарів на електронний спектр [8 - 9]. У роботі [10] отримано явний вигляд потенціальної енергії взаємодії квазічастинок з межею поділу у простій сферичній квантовій точці. Вважалося, що на границі існує перехідний шар, в якому діелектрична проникність є неперервною функцією координати. З врахуванням одержаних формул, обчислено електронні, діркові та екситонні спектри наногетеросистеми HgS / CdS . Проаналізовано фізичні властивості експериментально створених багатошарових складних наногетеросистем [11 - 12].

У поданій роботі розвинуто теорію для визначення енергетичного спектру та хвильової функції заряду для двошарової еліпсоїдальної КТ довільного ступеня сплюснутості. Отримано залежності енергії зв'язаних станів частинки від об'єму КТ і ступеня анізотропії її форми. Побудовано графіки густини ймовірності перебування електрона в досліджуваній гетероструктурі.

Енергетичний спектр та хвильові функції станів електрона

Розглядається двошаровий нанокристал з двома межами поділу у вигляді витягнутих сфероїдів (рис. 1.). Для запису рівняння Шредінгера здійснено перехід від декартових до витягнутих сфероїдальних координат:

$$\hat{H}\Psi(x, h, j) = E\Psi(x, h, j), \quad (1)$$

де $Y(x, h, f)$, E – хвильова функція та енергія квазічастинки, а гамільтоніан частинки в сфероїдально-симетричному полі має вигляд:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + U(x), \quad (2)$$

$$\text{де } U(x) = \begin{cases} \infty, & x = x_1, x = x_2 \\ 0, & x_1 \leq x \leq x_2 \end{cases}, \quad (3)$$

m_e – ефективна маса електрона в нанокристалі, $x = x_1$, $x = x_2$ – рівняння поверхонь внутрішнього і зовнішнього сфероїдів відповідно.

Після розділення змінних та розв'язку отриманих диференціальних рівнянь, можна отримати хвильову функцію електрона двошарової КТ у вигляді витягнутого сфероїда:

$$Y(x, h, f) = S_{mn}^{(1)}(c, h) \cdot (B_1 R_{mn}^{(1)}(c, x) + B_2 R_{mn}^{(2)}(c, x)) e^{imf}, \quad (4)$$

$$\text{де } S_{mn}^{(1)}(c, h) = \sum_{r=0,1}^{\infty} 'd_r^{mn}(c) P_{m+r}^m(h),$$

$$R_{mn}^{(1)}(c, x) = \frac{1}{\sum_{r=0,1}^{\infty} 'd_r^{mn}(c) \frac{(2m+r)!}{r!}} \left(\frac{x^2-1}{x^2} \right)^{m/2} \sum_{r=0,1}^{\infty} 'd_r^{mn}(c) \frac{(2m+r)!}{r!} j_{m+r}(cx)$$

$$R_{mn}^{(2)}(c, x) = \frac{1}{\sum_{r=0,1}^{\infty} 'd_r^{mn}(c) \frac{(2m+r)!}{r!}} \left(\frac{x^2-1}{x^2} \right)^{m/2} \sum_{r=0,1}^{\infty} 'd_r^{mn}(c) \frac{(2m+r)!}{r!} n_{m+r}(cx)$$

$P_{m+r}^m(h)$ – поліноми Лежандра, $j_{m+r}(cx)$, $n_{m+r}(cx)$ – сферичні функції Бесселя та Неймана, а коефіцієнти $'d_r^{mn}(c)$ знаходяться з відповідних

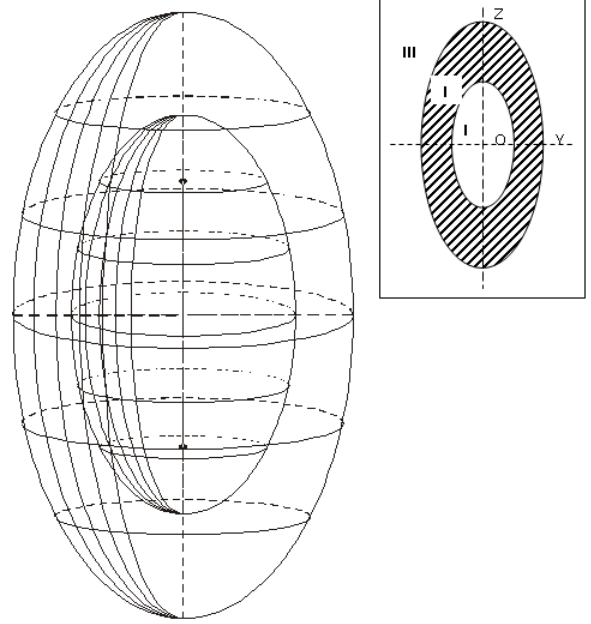


Рис. 1. Модель досліджуваного нанокристалу. На вставці – переріз нанокристалу в площині YOZ.

рекурентних формул [13].

Умова нормування для хвильової функції гетероструктури має наступний вигляд:

$$\frac{d^3}{8} \int_{x_1-1}^{x_1+1} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} (x^2 - h^2) (S_{mn}^{(1)}(c, h) \cdot (B_1 R_{mn}^{(1)}(c, x) + B_2 R_{mn}^{(2)}(c, x)) e^{imf})^2 df dh dx = 1 \quad (5)$$

Для знаходження енергетичного спектра квазічастинки у двошаровій квантовій точці сфероїдальної форми в наближенні нескінченно глибокої потенціальної ями потрібно використати наступні умови:

$$\Psi(x_1, h, j) = 0, \quad \Psi(x_2, h, j) = 0, \quad (6)$$

З умов (6) одержано систему однорідних рівнянь, яка має нетривіальний розв'язок, тоді коли детермінант рівний нулю:

$$\begin{vmatrix} R_{mn}^{(1)}(c, x_1) & R_{mn}^{(2)}(c, x_1) \\ R_{mn}^{(1)}(c, x_2) & R_{mn}^{(2)}(c, x_2) \end{vmatrix} = 0, \quad (7)$$

Отримано дисперсійне рівняння для частинки двошарової КТ. Розв'язавши його, можна визначити енергію дискретних станів квазічастинки в досліджуваному нанокристалі.

Обчислення проводились для структури скло/CdSe/скло. Об'єм КТ обмеженої сфероїдальними поверхнями залежить від фокусної відстані d та параметрів x_1 і x_2 , що визначають

поверхні внутрішнього і зовнішнього сфероїдів. При обчисленні енергії $E_{n_r, n, m}$ розглядались різні стани з квантовими числами $n_r = 1, 2, \dots$ номер кореня

рівняння (7), $n = 0, 1, 2, \dots$, $m = -n, -n+1, \dots, n$.

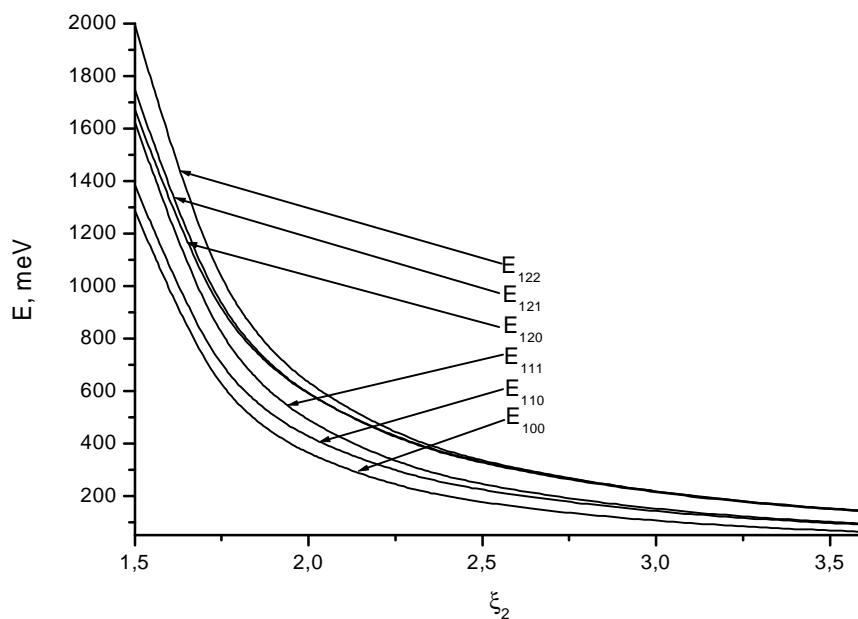


Рис.2. Залежність енергії електрона від ξ_2 двошаровій квантовій точці сфероїдальної форми при $\xi_1 = 1,1$ та $d=48 \text{ \AA}$.

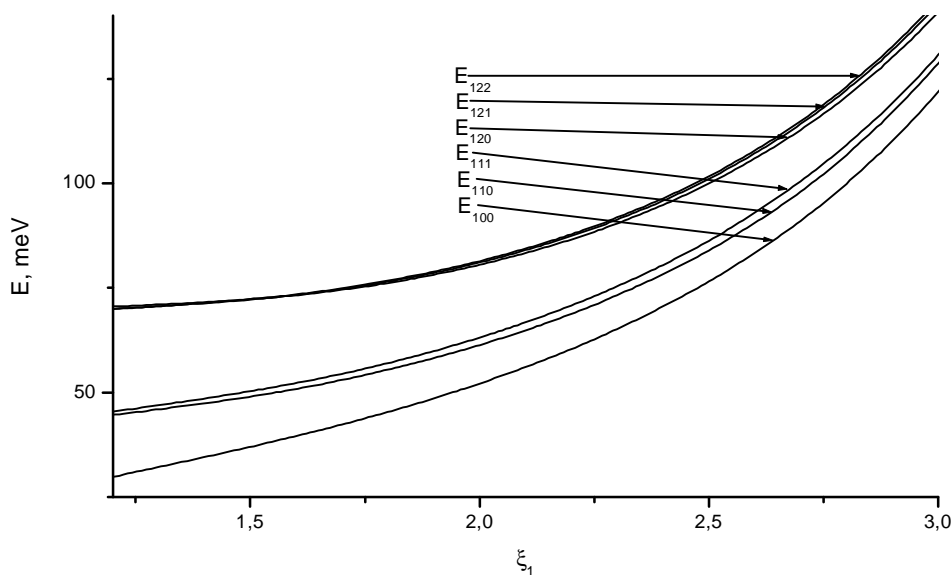


Рис.3. Залежність енергії електрона від ξ_1 в двошаровій квантовій точці сфероїдальної форми при $\xi_2 = 5$ та $d = 48 \text{ \AA}$

На рис. 2. наведено залежність енергії електрона складного нанокристала при фокусній відстані $d = 48 \text{ \AA}$ та параметру $\xi_1 = 1,1$. Зміна параметру ξ_2 веде до збільшення об'єму та зменшення коефіцієнта

витягнутості сфероїда (відношення більшої півосі до меншої). Як видно з рисунка, збільшення ξ_2 веде до монотонного зменшення енергії всіх станів. Крім того різниця між енергіями станів збільшується із

зменшенням ξ_2 . Розрахунки показують, що для $\xi_2 > 4$ енергія електрона у складному нанокристалі сфероїдальної форми практично збігається з енергією відповідної сферичної КТ.

Інший генезис енергетичного спектру заряду маємо при зміні параметра ξ_1 ($d=48 \text{ \AA}$, $\xi_2 = 5$). Збільшення ξ_1 від 1,1 до 3,5 (рис. 3) веде до зменшення шару II та анізотропії форми внутрішньої області I нанокристала. Енергія частинки будь-якого із досліджуваних станів зростає, що пояснюється зменшенням об'єму області II. Різниця між енергетичними рівнями із однаковими m збільшується, проте зменшується для станів із різними n .

Збільшення фокусної відстані d при фіксованих

ξ_1 та ξ_2 спричиняє збільшення об'єму шару II нанокристалу. Як видно з рис. 4 значення енергії частинки для досліджуваних станів зменшується із збільшенням d . Як і на рис. 2 зменшується різниця між енергетичними рівнями з однаковим n .

Для знаходження точного вигляду хвильової функції частинки в досліджуваній гетороструктурі, виразимо B_1 через B_2

$$B_1 = - \frac{R_{mn}^{(2)}(c, x_1)}{R_{mn}^{(1)}(c, x_1)} B_2, \quad (8)$$

і підставимо отриманий вираз в умову нормування (5). Отримаємо вираз для невідомого коефіцієнта хвильової функції квазічастинки:

$$B_2 = \sqrt{\frac{8}{d^3 \int_{x_1-1}^{x_2-1} \int_0^{2p} (x^2 - h^2) \left(S_{mn}^{(1)}(c, h) \cdot \left(- \frac{R_{mn}^{(2)}(c, x_1)}{R_{mn}^{(1)}(c, x_1)} R_{mn}^{(1)}(c, x) + R_{mn}^{(2)}(c, x) \right) e^{imj} \right)^2 dj dh dx}} \quad (9)$$

Використавши вирази (8) та (9), будемо мати явний вигляд хвильової функції.

Для знаходження густини ймовірності частинки в просторі у сфероїдальних координатах необхідно використати формулу:

$$r(x, h, f) = \frac{d^3}{8} (x^2 - h^2) |Y(x, h, f)|^2, \quad (10)$$

Підставимо у формулу (10) вигляд хвильової функції:

$$r(x, h, f) = \frac{d^3}{8} (x^2 - h^2) \left| S_{mn}^{(1)}(c, h) \cdot (B_1 R_{mn}^{(1)}(c, x) + B_2 R_{mn}^{(2)}(c, x)) e^{imf} \right|^2 \quad (11)$$

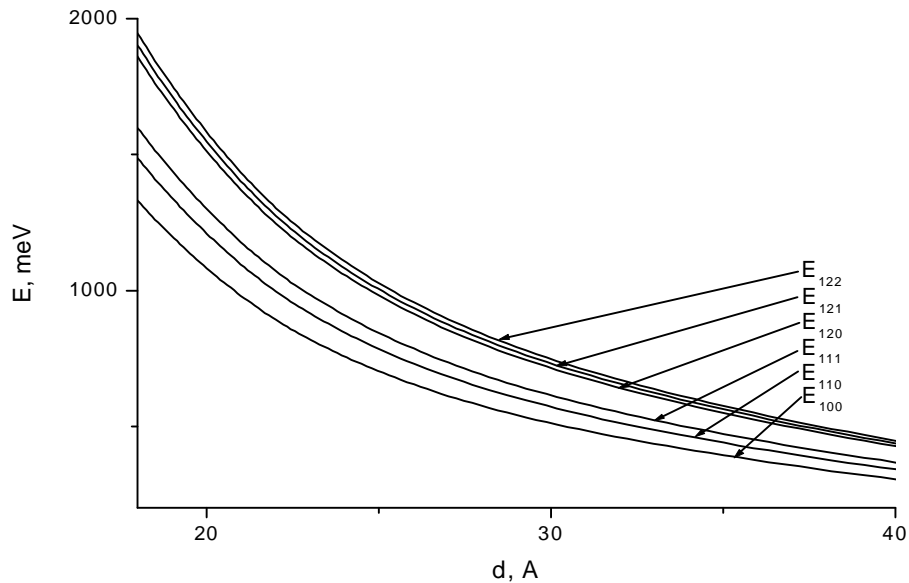


Рис.4. Залежність енергії електрона двошарової квантової точки сфероїдальної форми від d при $\xi_1 = 1,3$ та $\xi_2 = 3$

Для зручності аналізу результатів необхідно при обчисленнях перейти до декартових координат.

На рис. 5 подано результати обчислення густини ймовірності перебування електрона в області II складної квантової точки. Досліджувались густина ймовірності в площині XOY та XOZ. Графіки побудовані для частинки в КТ з такими параметрами:

$d = 36$, $\xi_1 = 1,1$ та $\xi_2 = 4$ для шести вибраних вище енергетичних станів. В роботі [2] побудовано аналогічні графіки для частинки в КТ обмеженій однією сфероїдальною поверхнею, але лише для станів E_{100} , E_{110} та $E_{11\pm 1}$.

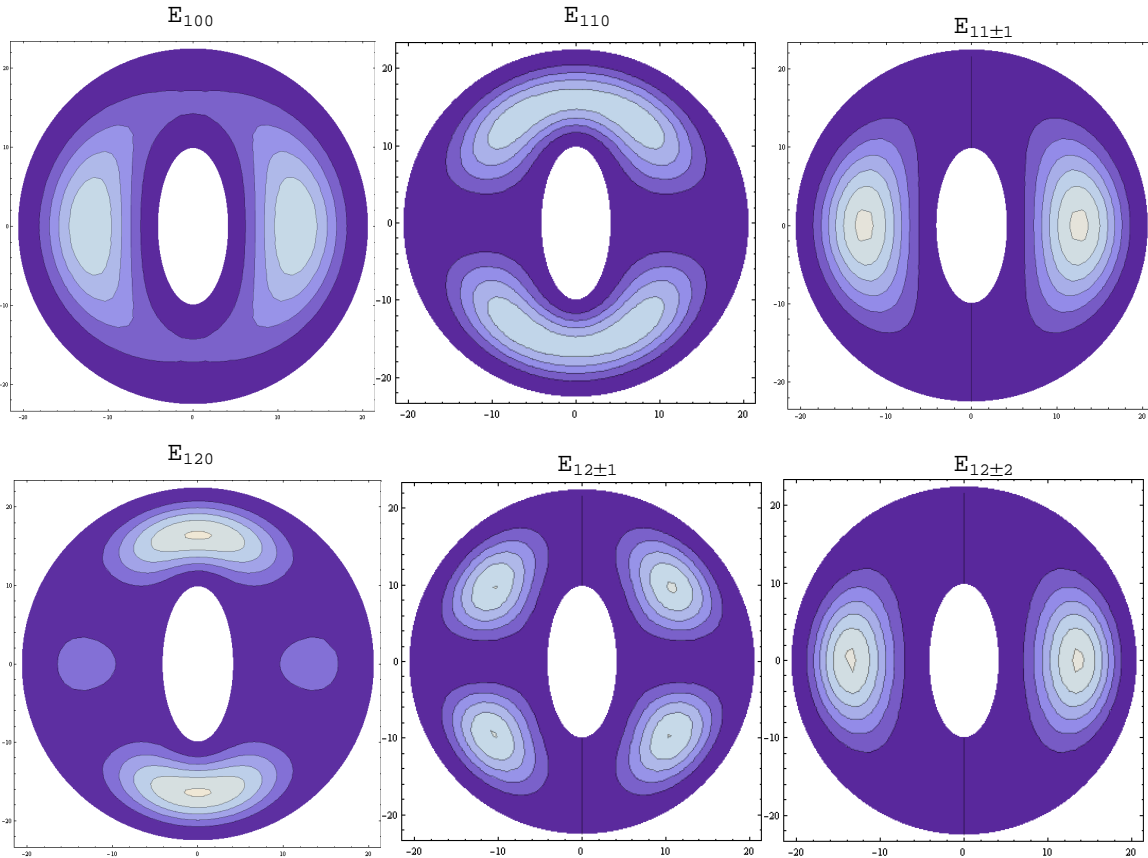


Рис. 5. Контурні графіки густини ймовірності перебування електрона у площині XOZ для шести найнижчих станів

Аналізуючи рис.5 видно, що в площині XOZ максимуми густини ймовірності перебування квазічастинки з енергією E_{100} спостерігаються по обидва боки від внутрішнього сфероїда в центральній частині шару II КТ. У площині XOY, вона стає максимальною посередині між сфероїдами.

Для станів E_{110} та $E_{11\pm 1}$ густина ймовірності перебування електрона в площині XOY рівна нулю. Цей результат можна пояснити тим, що зазначені стани є аналогічними до p-станів сферичної КТ, в якій густина ймовірності має гантелеподібний вигляд із мінімумом у початку координат. При розгляді густини ймовірності в площині що проходить через фокуси і паралельна XOY, максимум для стану E_{110} спостерігається ближче до фокусу, ніж для $E_{11\pm 1}$.

Для частинки з енергією стану E_{120} , $E_{12\pm 1}$ в площині XOY густина ймовірності рівна нулю, для стану $E_{12\pm 2}$ – відмінна від нуля. Тому для станів E_{120} , $E_{12\pm 1}$ залежності будувались в площині, що паралельна до XOY і знаходиться на відстані $\frac{d}{2}$ від

неї. Для стану E_{120} густина ймовірності в цій площині має менші значення ніж для стану $E_{12\pm 1}$. З рис. 5 видно, що в площині XOZ стан E_{120} характеризується не симетричною функцією Γ на відміну від $E_{12\pm 1}$. Проте для обидвох станів є чотири максимуми густини ймовірності: для E_{120} два максимуми більші за два інші, а для $E_{12\pm 1}$ – усі чотири максимуми однакові. Частинка з енергією $E_{12\pm 2}$ має інші характеристики густини ймовірності, ніж в станах E_{120} та $E_{12\pm 1}$. Як зазначено вище, густина ймовірності перебування частинки для цього стану в площині XOY відмінна від нуля, і має подібні характеристики, що і для стану E_{100} . А в площині XOZ густина ймовірності характеризується двома максимумами, які розміщені по обидва боки внутрішнього сфероїда.

Таким чином, в роботі на прикладі гетероструктури *скло/CdSe/скло* досліджено залежність енергетичного спектру та густини ймовірності складної еліпсоїдальної квантової точки від параметрів внутрішньої та зовнішньої меж поділів. На відміну від КТ сферичної форми енергія

заряду залежить і від магнітного квантового числа. Величина розщеплення рівнів по m залежить від площі межі поділу та фокусної відстані КТ.

Проаналізовано генезис густини ймовірності перебування частинки у просторі при зміні геометричних параметрів складної квантової точки.

- [1] G. Cantele, D. Ninno and G. Iadonisi // *J. Phys.: Condens. Matter.*, **12**, pp. 9019-9036 (2000).
- [2] G. Cantele, D. Ninno and G. Iadonisi // *Nano Letters.*, **1**(3), pp. 121-124. (2001).
- [3] G. Cantele, D. Ninno, and G. Iadonisi // *Phys. Rev. B.*, **64**, pp. 125325-125334 (2002).
- [4] H. Leon, J.L. Marin, R. Riera // *Physica E.*, **27**, pp. 385-396 (2005).
- [5] Г.Г. Зегря, О.В. Костантинів, А.В. Матвєєнцев // *ФТП*, **37**(3), сс. 334-338 (2003).
- [6] V.I. Boichuk, V.B. Hol'skyi, R.Yu. Kubay, R.I. // *Lukin Ukrainian Journal of Physics.* **53**(6), pp.574-578 (2008).
- [7] Н.В. Ткач // *ФТТ*, **39**(6), сс. 1109-1114 (1997).
- [8] В.І. Бойчук, Р.Ю. Кубай, І.В. Білінський // *Журн. фіз. дослідж.*, **3**(2), сс. 187-191 (1999).
- [9] В.І. Бойчук, І.В. Білінський, Р.Ю. Кубай. // *УФЖ*, **45**(2), сс. 236-241 (2000).
- [10] V.I. Boichuk, R.Yu. Kubay // *Jorn. of Physical Studies*, **3**(4), pp. 492-497 (1999).
- [11] D. Schooss, A. Mews, A. Eychmuller // *Weller H. Phys. Rev. B.* **49** (24), pp.17072-17078 (1994).
- [12] A. Mews, A.V. Kadavanich, U. Banin, A.P. Alivisatos // *Phys. Rev.B.* **53**(20), pp. 13242-13245 (1996).
- [13] Le-Wei Li, Xiao-Kang Kang, Mook-Seng Leong *Spheroidal Wave Functions in Electromagnetic Theory.* New York. — 296 p. (2002).

V.I. Boychuk, V.B. Holskyy, R.I. Lukin

Investigation of the Energy Spectrum and Probability Density Stay Quasiparticles in Two-Layer Nanocrystals Ellipsoidal Shape

*Drohobych State Pedagogical University named after Ivan Franko
Institute of Physics, Mathematics and Computer Science*

In this work the electron energy spectrum in quantum dot two-layer spheroidal shape. The problem is solved in approximate infinitely deep potential pit. Investigated the probability density of quasiparticles in the host heterostructure investigated. Calculations carried out for glass structure / CdSe / glass.

Key words: quantum dots, nanocrystals, the energy spectrum, spheroidal shape, the probability of staying.