

В.І. Бойчук, В.Б. Гольський

## Вплив форми нанокристала на енергетичний спектр частинки в тунельно-зв'язаних квантових точках

*Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, кафедра теоретичної фізики  
Україна, 82100, м Дрогобич, вул. Івана Франка, 24, тел.: (03244)3-54-65*

В цій роботі розв'язана задача про знаходження енергетичного спектра частинки в циліндричній і кубічній КТ. Вперше зроблено аналіз впливу форми нанокристала на енергетичний спектр заряду в тунельно-зв'язаних КТ. Розглядались КТ сферичної, кубічної та циліндричної форми.

**Ключові слова:** тунельно-зв'язані квантові точки, енергетичний спектр квазічастинки.

*Стаття поступила до редакції 04.08.2006; прийнята до друку 10.10.2006.*

### Вступ

Квазінульвимірні структури, які ще називають квантовими точками (КТ), почали досліджувати у середині 80-х років, але і даний час вони є одним центральних об'єктів дослідження фізики твердого тіла. У таких об'єктах заряди обмежені у всіх трьох напрямках і тому вони мають дискретний спектр. Сучасні методи діагностики дають можливість стверджувати, що КТ можуть мати форму близьку до сферичної, еліптичної, циліндричної, пірамідальної, кубічної, конусоподібної. В роботах [1-2] за допомогою атомно-силової мікроскопії було визначено, що в структурах Ge/Si і CdSe/ZnSe наноострівки мають форму піраміди і купола. Часто в процесі виготовлення кристалів температури термообробки є більшими від температури плавлення напівпровідникових кристалів, кристаліти в процесі росту знаходяться в рідкому стані і, за рахунок поверхневого натягу, мають форму, що близька до сферичної [3]. На даний час експериментально створені багат шарові складні сферичні наногетеросистеми [4-5]. Про форму КТ, отриманих на основі CuCl в матриці NaCl, близьку до кубічної сказано в роботі [6]. В структурах InAs/GaAs, InGaAs/AlGaAs та Si/Ge було отримано квантові точки циліндричної форми [7-9].

Теоретичний аналіз енергетичного спектра квазічастинки в КТ різної форми може дати можливість визначити форму нанокристалів за спектрами фотолюмінісценції, а також підібрати кращі матеріали для квантових перемикачів, оскільки форма КТ часто пов'язана з певними матеріалами. Для аналізу нами було обрано КТ

кубічної, циліндричної та сферичної форми.

### I. Елементарна частинка у ізольованій КТ циліндричної та кубічної форми

В теоретичних роботах КТ моделюються за допомогою потенціальних ям з різними утримуючими потенціалами, але краще збіжність з експериментальними роботами дає прямокутна потенціальна яма скінченної величини:

$$U(\vec{r}) = \begin{cases} 0, & \text{за межами КТ} \\ U_0, & \text{в області КТ} \end{cases}$$

де  $U_0 < 0$ .

Розглядаючи тривимірні випадки, слід відмітити, що точно можна розв'язати задачу про знаходження енергетичного спектра частинки в скінченній прямокутній потенціальній ямі сферичної форми. Для циліндричної та кубічної КТ така задача точно не розв'язується, оскільки неможливо розділити змінні при розв'язку рівняння Шредінгера для частинки в потенціальних ямах такої форми.

Щоб врахувати дану проблему, розглядаємо наближений вигляд потенціальних енергій на прикладі однієї ями покажемо, що вибраний вигляд потенціальної енергії є добрим наближенням. Нехай у нульовому наближенні потенціальна енергія заряду для кубічної КТ має вигляд:

$$U_q(x, y, z) = U(x) + U(y) + U(z) \quad (1)$$

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & 0 \leq x \leq a, \\ 0, & x > a \end{cases}$$

$$U(y) = \begin{cases} 0, & y < 0 \\ U_0, & 0 \leq y \leq a, \\ 0, & y > a \end{cases}, \quad U(z) = \begin{cases} 0, & z < 0 \\ U_0, & 0 \leq z \leq a, \\ 0, & z > a \end{cases}$$

а для циліндричної КТ її можна записати так:

$$U_c(\rho, \varphi, z) = U(\rho, \varphi) + U(z), \quad (2)$$

$$U(\rho, \varphi) = \begin{cases} U_0, & \rho > R \\ 0, & \rho \leq R \end{cases}, \quad U(z) = \begin{cases} 0, & z < 0 \\ U_0, & 0 \leq z \leq a, \\ 0, & z > a \end{cases}$$

$$U_0 < 0,$$

$U_q(x, y, z)$ ,  $U_c(\rho, \varphi, z)$  – потенціальна енергія частинки відповідно у КТ кубічної і циліндричної форми.

Покажемо можливість такого наближення. Для цього за допомогою теорії збурення знайдемо енергію частинки в кубічній і циліндричній КТ, для яких незбуреною задачею буде скінчена прямокутна потенціальна яма сферичної форми. Розв'язки задачі про знаходження енергії та хвильової функції частинки в одній скінченій сферичній потенціальній ямі наведено у роботі [14].

Гамільтоніан частинки в КТ кубічної форми представимо в наступному вигляді:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{U}, \quad (3)$$

де  $\hat{H}_0 = \hat{T} + U_0(\vec{r})$  – гамільтоніан частинки в одній сферичній скінченій прямокутній потенціальній ямі,  $\hat{U} = U_q(x, y, z) - U_0(\vec{r})$  – різниця потенціальних енергій частинки відповідно в КТ кубічної і сферичної форми, яка виступає збуренням в даній задачі.

Згідно з теорії збурення енергія частинки з врахуванням першої поправки обчислюється за формулою:

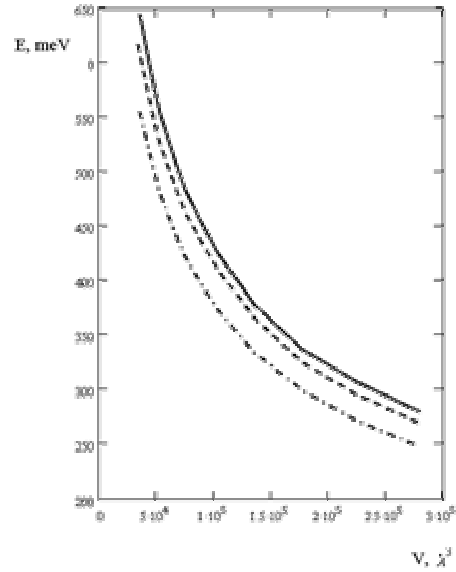
$$E = E_0 + E', \quad (4)$$

де  $E' = \int \psi_0^*(x, y, z) \cdot \hat{U} \cdot \psi_0(x, y, z) dt$ ,  $E_0$  та  $\psi_0(x, y, z)$  – енергія та хвильова функція частинки в одній сферичній скінченій прямокутній потенціальній ямі.

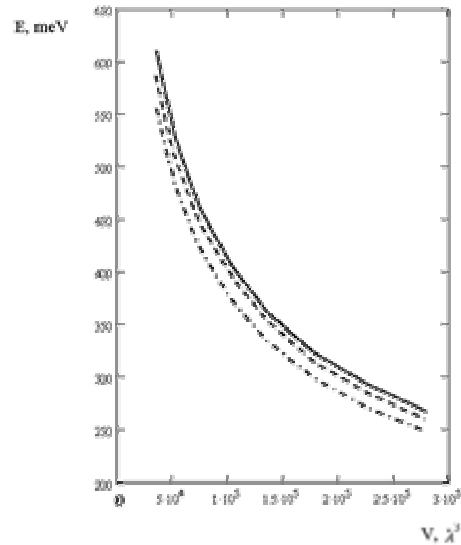
Аналогічний хід розв'язку для КТ циліндричної форми з потенціальною енергією частинки  $U_c(\rho, \varphi, z)$ .

Конкретні розрахунки проведені для системи  $\beta$ -HgS/CdS, в якій КТ  $\beta$ -HgS, що моделюється кубічною або циліндричною скінченою КТ, знаходиться в матриці CdS. Щоб похибка, при обчисленні енергії частинки в КТ кубічної і циліндричної форми, була найменшою, потрібно щоб їхній об'єм був такий як у сферичній.

На рис. 1,2 представлено залежність енергії частинки в одній КТ кубічної форми та циліндричної форми від об'єму КТ. Штрих-пунктирною лінією показано енергію частинки в сферичній КТ, суцільною лінією – енергію частинки, що обчислена



**Рис. 1.** Енергія частинки в одній КТ циліндричної форми в залежності від об'єму КТ. Штрих-пунктирна: енергія в сферичній КТ; суцільна лінія: енергія частинки обчислена за допомогою пропонованої моделі; штрихова лінія: енергія частинки з врахуванням поправок теорії збурень.



**Рис. 2.** Енергія частинки в одній КТ кубічної форми в залежності від об'єму КТ. Штрих-пунктирна лінія: енергія в сферичній КТ; суцільна лінія: енергія частинки обчислена за допомогою пропонованої моделі; штрихова лінія: енергія частинки з врахуванням поправок теорії збурень.

у випадку потенціалу (1 та 2) а штриховою лінією – енергію частинки отриману за допомогою теорії збурення.

Виявилось, що різниця між енергією частинки обчисленої згідно запропонованої моделі і за допомогою теорії збурень складає 3-6 відсотка. Із зростанням об'єму різниця між ними спадає. Так для КТ кубічної форми при об'ємі  $35 \text{ nm}^3$  вона складає

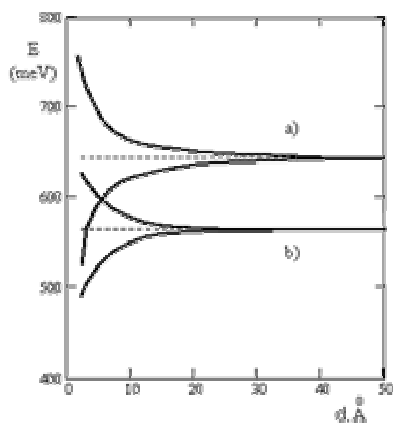
5,6%, а при  $280 \text{ nm}^3$  – 5,5%. Для КТ циліндричної форми при  $35 \text{ nm}^3$  – 4,1%, а при  $280 \text{ nm}^3$  – 3,6%. З чого випливає, що для КТ циліндричної форми вибрана модель дає кращу збіжність ніж для КТ кубічної форми. Але в обох випадках поправки досить малі, що вказує на можливість використання її в подальших розрахунках.

Слід відмітити, що існують обмеження за величиною розмірів КТ на використання даної моделі. Її, очевидно, не можна використовувати для КТ кубічної та циліндричної форми тоді, коли їх об'єм менший від об'єму сферичної КТ, в якій уже не існує енергетичних рівнів.

## II. Тунельно-зв'язані КТ різної форми

Як відомо для створення квантового комп'ютера є цікавими структури з двома енергетичними рівнями. Для цього можна використати і дві тунельно-зв'язані КТ. В зв'язку з тим є актуальним аналіз впливу форми нанокристалу на величину розщеплення енергетичних рівнів частинки в тунельно-зв'язаних КТ та його залежність від відстані між КТ. Для цього розглядалися КТ різної форми (кубічної [11], циліндричної [12] та сферичної [10,13]) з однаковим об'ємом, використовуючи наведені вище наближення та метод лінійної комбінації орбіталей квантових ям. Обчислення проводилися для системи  $\beta\text{-HgS/CdS}$ , в якій нанокристал  $\text{HgS}$ , що моделюється скінченною квантовою ямою, знаходиться в матриці  $\text{CdS}$ .

На рис. 3., зображено результати дослідження



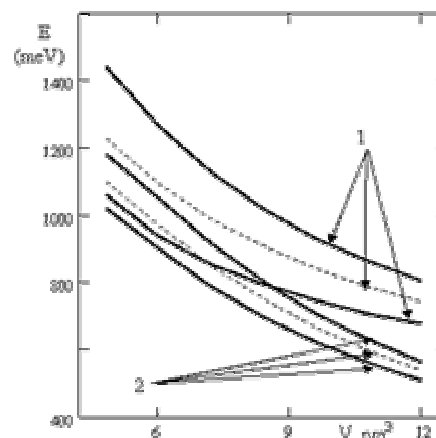
**Рис. 3.** Залежність енергетичних рівня електрона в двох тунельно-зв'язаних КТ однакового об'єму ( $35 \text{ nm}^3$ ), від відстані між ними: а) кубічні КТ, б) сферичні КТ.

двох тунельно-зв'язаних КТ кубічної та сферичної форми однакового об'єму ( $V = 35 \text{ nm}^3$ ). Як видно з рисунка, енергія електрона в гетероструктурі з кубічними КТ є більшою, ніж з сферичними. Для обох гетеросистем зменшення відстані між поверхнями розділу веде до збільшення розщеплення  $\Delta E$  енергетичного рівня системи. Однак величина

розщеплення в кубічній гетероструктурі є більшою, ніж у сферичній. Зокрема, для сферичних КТ на відстані двох сталих ґратки ( $d = 11,6 \text{ Å}$ )  $\Delta E = 26,5 \text{ meV}$ , а для кубічних –  $\Delta E = 61,3 \text{ meV}$ . Слід відмітити, що в КТ кубічної форми розщеплення відбувається на більших відстанях, ніж у сферичних і циліндричних.

Але величина розщеплення залежить не лише від відстані між двома КТ, але й від розмірів нанокристалів. Із зменшенням радіусу нанокристалів, величина  $\Delta E$  збільшується. На рис. 4. показано залежність енергетичних рівнів в гетероструктурі з циліндричними (1) і сферичними (2) КТ. Так, для сферичних КТ при  $d = 11,6 \text{ Å}$  і об'ємі  $V = 6 \text{ nm}^3$  одержано, що  $\Delta E = 76,87 \text{ meV}$ , а коли  $V = 35 \text{ nm}^3$ , то для тієї ж відстані величина  $\Delta E = 26,5 \text{ meV}$ . Отже, зменшення радіуса нанокристалів супроводжується суттєвим взаємним впливом на зміну енергетичного спектру. Аналізуючи вплив форми на розщеплення енергетичних рівнів, потрібно відмітити, що КТ циліндричної форми розщеплюються сильніше, зокрема для  $d = 11,6 \text{ Å}$  і об'ємі  $V = 35 \text{ nm}^3$  отримано, що  $\Delta E = 41,2 \text{ meV}$ .

Для нанокристалів різних радіусів, ефективна взаємодія між ними менша. В цьому випадку система характеризується двома рівнями, які починають зсуватись на менших відстанях, ніж це було при однакових радіусах. Цікаво відмітити, що енергетичний рівень, який належить меншій КТ зсувається більше, ніж нижчий рівень, що належав більшій КТ. Даний результат вказує на те, що у випадку  $R_1 \neq R_2$ , електрон в результаті взаємодії двох нанокристалів сильніше локалізується в більшому нанокристалі. Як і для симетричної структури, енергія електрона в кубічних КТ є більшою, ніж в сферичних і циліндричних, також взаємодію відчутно на більших відстанях.



**Рис. 4.** Залежність енергії електрона (суцільні лінії) двох тунельно-зв'язаних КТ на відстані  $d = 11,6 \text{ Å}$ , від їх розмірів: 1 – циліндричні КТ, 2 – сферичні КТ (штриховою лінією відмічено енергію рівня однієї квантової точки такого ж об'єму).

Таблиця

Форма	Розміри, Å	Енергія електрона в одній ізольованій КТ, меВ	Величина розщеплення, меВ
Куб	$a = 23,4$	916,6	37,4
Циліндр	$D = 26,4; h = 23,4$	862,4	21,3
Сфера	$D = 29$	771	14,6

Далі ми проводили дослідження таких КТ, що коли вони ізольовані, то в них існує два енергетичні рівні. Для двох однакових за розміром КТ зменшення відстані між поверхнями розділу веде до збільшення розщеплення  $\Delta E$  енергетичних рівнів системи. Причому рівень основний стан розщеплюється менше, ніж – перший збуджений. Зокрема, для  $d=5,8$  Å та  $R_1 = R_2 = R = 30$  Å,  $\Delta E_s = 48$  меВ, а  $\Delta E_p = 183$  меВ.

В результаті розщеплення основного та збудженого станів при зменшенні  $d$  виникає, замість двох, спочатку три, а при  $d \leq 11,6$  Å ( $R_1 = R_2 = R = 27$  Å) чотири енергетичні рівні. Енергія першого і третього рівнів зменшується при зменшенні відстані між поверхнями розділу квантових точок, а другого та четвертого – зростає. Причому зменшення  $d$  веде до зменшення (збільшення) енергії між третім (четвертим) та двома нижніми рівнями.

Як і для КТ з одним енергетичним рівнем, величина розщеплення залежить не лише від відстані  $d$  для двох КТ, але й від розмірів нанокристалів. Чим менший радіус нанокристалів, тим більша величина  $\Delta E$ . Зокрема, для сферичних КТ, якщо  $d = 5,8$  Å то для КТ з  $V = 180$  нм<sup>3</sup> одержано, що  $\Delta E_0 = 38,7$  меВ, а  $\Delta E_1 = 133,1$  меВ, а для кубічних –  $\Delta E_0 = 54,3$  меВ,  $\Delta E_1 = 205,3$  меВ. Отже, зменшення радіуса нанокристалів супроводжується збільшенням взаємного впливу на зміну енергетичного спектру системи КТ.

Для різних за розмірами нанокристалів, обчислення показали, що ефективна взаємодія між ними менша, ніж з однаковими КТ. У цьому випадку система характеризується чотирма рівнями, які дуже слабо відхиляються від відповідних рівнів ізольованих КТ.

Дослідивши енергетичний спектр частинки в системі двох тунельно-зв'язаних КТ різної форми,

потрібно зробити аналіз, як впливає форма нанокристалу на величину розщеплення енергетичних рівнів. Для цього ми дослідили нанокристали однакового об'єму  $V = 102$  нм<sup>3</sup> на відстані  $17$  Å, але різної форми. Результати обчислення наведені в таблиці. Оскільки об'єм однаковий геометричні розміри будуть залежати від нього. Вони наведені у другому стовпці таблиці. У третьому стовпці наведена енергія електрона в одній ізольованій КТ даного розміру і форми. А в останньому – величина розщеплення в меВ. Як бачимо з результатів, найбільше відчувають взаємодію КТ кубічної форми, а найменше – сферичної. Це пов'язано з особливістю перекриття хвильових функцій в гетероструктурах з КТ різної форми.

## Висновки

Отже, в даній роботі запропоновано та обґрунтовано метод знаходження енергетичного спектру частинки в квантових точках циліндричної та кубічної форми. Зроблено порівняльний аналіз впливу форми нанокристалу на енергетичний спектр частинки в ізольованих та тунельно-зв'язаних КТ. Встановлено, що при однаковому об'ємі КТ, найбільшу енергію частинка має в КТ кубічної форми, а найменшу – у сферичній КТ. Також величина розщеплення енергетичних рівнів є найбільшою в КТ кубічної форми, а найменшою в – сферичних КТ.

**Бойчук В.І.** – доктор фізико-математичних наук, професор, директор Інституту;  
**Гольський В.Б.** – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри теоретичної фізики.

- [1] А.В. Двуреченский, А.И. Якимов. Электронный транспорт и оптические переходы в гетероструктурах Ge/Si с квантовыми точками. // 1-а Українська наукова конференція з фізики напівпровідників: Тези доповідей. Одеса, с. 6 (2002).
- [2] М.Я. Валах, П.М. Литвин, В.А. Юхимчук, З.Ф. Красильник, А.Н. Новиков, С.В. Иванов, П.С. Копьев, Т.В. Шубина. Оптические исследования самоорганизованных Ge/Si и CdSe/ZnSe наноструктур // 1-а Українська наукова конференція з фізики напівпровідників: Тези доповідей. Одеса, сс. 38-39 (2002).
- [3] А.И. Екимов, А.А. Онущенко, В.А. Цехомский. Экситонное поглощение кристами CuCl в стеклообразной матрице // ФХС, **6**(4), сс. 511-512 (1980).
- [4] D. Schooss, A. Mews, A. Eychmuller, H. Weller. Quantum dot quantum well CdS/HgS/CdS: theory and experiment // *Phys. Rev. B*, **49**(24), pp.17072-17078 (1994).
- [5] A. Mews, A.V. Kadavanich, U. Banin, A.P. Alivisatos. Structural and spectroscopic investigations of CdS/HgS/CdS quantum-dot quantum wells // *Phys. Rev. B*, **53**(20), pp. 13242-13245 (1996).
- [6] N. Sakakura, Y. Masumoto. Persistent spectral-hole-burning spectroscopy of CuCl quantum cubes // *Phys. Rev. B*, **56** p. 4051 (1997).

- [7] А.В. Ларионов, В.Б. Тимофеев, М. Bayer, А. Forchel. Магнитоспектроскопия InAs/GaAs квантовых точек тунельно-связанных в пары // *Нанофотоника*, сс. 109-114 (2001).
- [8] K. Ono, D.G. Austing, Y. Tokura, S. Tarucha. Angular momentum selectivity in tunneling between two quantum dots // *Physica B: Condensed Matter*, **314**(1-4), pp. 450-454 (2002).
- [9] А.Г. Макаров, Н.Н. Леденцов, А.Ф. Цацульников, Г.С. Цырлин, В.А. Егоров, В.М. Устинов, Н.Д. Захаров, P. Werner. Исследование оптических свойств структур со сверхплотными массивами квантовых точек Ge в матрице Si // *ФТП*, **37**(2), сс. 219-223 (2003).
- [10] В.І. Бойчук, В.Б. Гольський. Дослідження впливу взаємодії двох сферичних нанокристалів системи  $\beta$ -HgS/CdS на енергетичний спектр електрона // *УФЖ*, **46** (3), сс. 342-345 (2001).
- [11] В.І. Бойчук, І.В. Білинський, В.Б. Гольський. Електрон у двох зв'язаних наногетерокристаллах кубічної форми // *УФЖ*, **48**(1), сс. 56-60 (2003).
- [12] В.І. Бойчук, В.Б. Гольський. Екситон Ванье-Мотта у двох тунельно-зв'язаних квантових точках циліндричної форми // *Наукові записки НаУКМА*, **23**, сс. 50-53 (2004).
- [13] В.І. Бойчук, В.Б. Гольський. Енергія одного та двох електронів в двох сферичних нанокристаллах системи  $\beta$ -HgS/CdS // *Журнал фізичних досліджень*, **8**(3), сс. 122-126 (2004).
- [14] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория, Т.3.*

V.I.Boichuk, V.B. Holskyi

## **Influence of the Form Nanocrystal on a Energy Spectrum Particle in the Tunnel-bound Quantum Dots**

*Drohobych Ivan Franko State Pedagogical University. Department of theoretical physics  
24 Franko St., Drohobych UA-82100, Lviv Region, Ukraine*

In this work the problem of finding of particle energy spectrum in cylindrical- and cubic-shaped QD is solved. The analysis of the influence of the shape of nanocrystal of energy spectrum of the charge in tunnel-bound QDs is performed for the first time. QDs of spherical, cylindrical and cubic shape are considered.

**Keywords:** the tunnel-bound quantum dots, energy spectrum of a quasi-particle.