УДК.621.315 Физика

УПРАВЛЕНИЕ ЭНЕРГИЕЙ ОСНОВНОГО ПЕРЕХОДА В ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ, ПОКРЫТОЙ СЛОЕМ КВАНТОВОЙ ЯМЫ

Армен АЛЕКСАНЯН, Карен АРАМЯН,

Грачиа НИКОГОСЯН, Ваге БУНИАТЯН

***Ключевые слова**: Квантовая точка, квантовая яма, гетероструктура, энергия основного перехода.*
***Բանալի բառեր**՝ քվանտային կետ, քվանտային փոս, հետերոկառուցվածք, հիմնական անցման էներգիա:*
***Key words**. Quantum dot, quantum well, heterostructure, basic energy transition.*

A.Aleksanyan, K.Aramyan, G.Nikoghosian, V.Buniatyan

Energy Management of the Main Transition in Cylindrical Quantum Dot, Covered with a Layer of the Quantum Well

It is shown that in the heterostructure quantum dots of cylindrical form, covered by a quantum well, is possible to control the energy of the main transition. The dependence of the energy of the main transition from the radius of cylinder is determined:

Վ.Բունիաթյան, Հ.Նիկողոսյան, Կ.Արամյան, Ա.Ալեքսանյան

Քվանտային փոսի շերտով ծածկված գլանաձև քվանտային կետի հիմնական ամցման էներգիայի կառավարում

Ցույց է տրված, որ գլանաձև քվանտային կետերով հետերոկառուցվածքներում, որոնք ծածկված են քվանտային փոսով, հնարավոր է կառավարել հիմնական անցման էներգիայով: Որոշված է հիմնական անցման էներգիայի կախումը գլանի շառավղից:

Показано, что в гетероструктурах квантовыми точками цилиндрической формы, покрытыми квантовой ямой, можно управлять энергией основного перехода. Определена зависимость энергии основного перехода от радиуса цилиндра.

Гетероструктуры с КТ вызывают повышенный интерес исследователей благодаря перспективам их применения в оптоэлектронике, в частности, для создания высокоэффективных инжекционных лазеров для волоконно-оптических линий связи [1].

Актуальной задачей является выращивание структур, излучающих в окне максимальной прозрачности оптического волокна на длине волны $\lambda \approx 1{,}55$ мкм, которой соответствует энергия основного перехода в квантовой точках, $E_0 \approx 0.8$ эВ.

Одним из методов расширения спектрального диапазона излучающих приборов на основе арсенида галлия является применение структур, в которых квантовые точки InAs заращены слоем квантовой ямы [2,3].

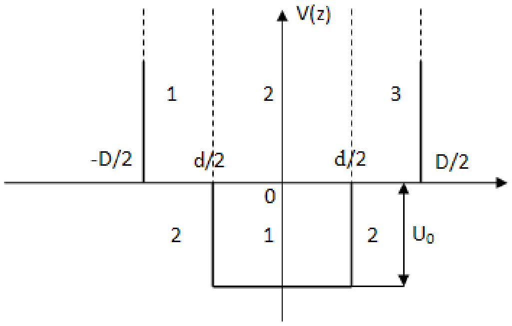
Поэтому, целью данной работы является определение зависимости энергии основного перехода в КТ от толщины и состава покровного слоя.

С другой стороны экспериментальные наблюдения массивов КТ InAs на подложке GaAs показывают, что InAs представляют собой сильно сплюснутые эллипсоидальные кластеры [4]. Однако, в [5] показано, что квантовые уровни КТ подобной формы можно получить заменой на КТ цилиндрической формы.

2. Уравнение Шредингера, описывающее движение в z направлении при параболическом законе дисперсии имеет вид

$$\left\{\frac{d^2}{dz^2} + \frac{2m_1^*}{\hbar^2}\left(E_z - V(z)\right)\right\}\psi(z) = 0, \quad \text{где } V(z) = \begin{cases} -U_0; |z| \le \frac{d}{2} \\ 0; |z| \succ \frac{d}{2} \end{cases} \qquad (1)$$

При значении энергии $\left|E_z\right| \prec U_0$ (рис.1) приходим к следующим двум уравнениям



$$\left(\frac{d^2}{dz^2}+k^2\right)\psi_1 = 0, |z| \le \frac{d}{2},$$
$$\left(\frac{d^2}{dz^2}-q^2\right)\psi_2 = 0, |z| \succ \frac{d}{2} \qquad (2)$$

где $k = \sqrt{\frac{2m_1^*}{\hbar^2}(U_0 + E_z)}, q = \sqrt{-\frac{2m_2^*}{\hbar^2}E_z}$ (3)

Вне квантовой точки, в областях $|z| \succ \frac{d}{2}$, $\psi_2 = Ae^{-q|z|}$

Внутри квантовой точки, для состояний положительной четности $|z| \le \frac{d}{2}$

$$\psi_1^{(+)} = B\cos kz, \qquad \psi_1^{(-)} = C\sin kz$$

Из условия непрерывности в точке $z = \frac{d}{2}$ для состояний (+) четности имеем

$$B\cos\frac{kd}{2} = Ae^{-\frac{qd}{2}} \qquad B\sin\frac{kd}{2} = A\frac{q}{k}e^{-\frac{qd}{2}}$$

Уровни энергии E_{Hz} в квантовой точке для состояний положительной четности определяются из трансцендентного уравнения

$$tg\frac{kd}{2} = \frac{q}{k}, \qquad k = \sqrt{\frac{2m_1^*U_0}{\hbar^2} + \frac{2m_1^*}{\hbar^2}E_z} = \sqrt{\frac{2m_1^*U_0}{\hbar^2} - \frac{m_1^*}{m_2^*}q^2} \qquad (4)$$

где m_1^* и m_2^* –эффективные массы электрона в области квантовой точки и в среде квантовой ямы, соответственно.

Из условия нормировки волновой функции $\int|\psi_1|^2 dz = 1$ внутри квантовой точки, имеем

$$B = \left(\frac{2}{d}\right)^{\frac{1}{2}}\left(1+\frac{\sin kd}{kd}\right)^{-\frac{1}{2}}.$$

Найдем разрешенные уровни энергии $E_z \succ 0$, попадающие в широкую часть квантовой ямы с бесконечно высокими стенками. В областях 1 и 3 имеем следующее уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2^*}\frac{d^2}{dz^2}\psi = E_z\psi,$$

в области 2
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1^*}\frac{d^2}{dz^2} - U_0\right)\psi = E_z\psi$$

Соответствующие решения имеют вид $\psi_j = A_j\exp(ik_jz) + B_j\exp(-ik_jz), j = 1,2,3$

где $k_1 = k_3 = \sqrt{\frac{2m_2^*}{\hbar^2}E_z}, \qquad k_2 = \sqrt{\frac{2m_1^*}{\hbar^2}(E_z + U_0)}$

Из условия непрерывности плотности вероятности и плотности потока вероятности на границах $|z| = \frac{d}{2}$ и $|z| = \frac{D}{2}$

$$\psi\left(z=-\frac{d}{2}\right)=\psi\left(z=-\frac{d}{2}\right),\quad \psi\left(z=+\frac{d}{2}\right)=\psi\left(z=\frac{d}{2}\right)$$

$$\frac{1}{m_2^*}\left(\frac{d\psi}{dz}\right)_{z=-\frac{d}{2}}=\frac{1}{m_1^*}\left(\frac{d\psi}{dz}\right)_{z=-\frac{d}{2}},\quad \frac{1}{m_1^*}\left(\frac{d\psi}{dz}\right)_{z=\frac{d}{2}}=\frac{1}{m_2}\left(\frac{d\psi}{dz}\right)_{z=\frac{d}{2}}$$

$$\psi\left(z=-\frac{D}{2}\right)=\psi\left(z=\frac{D}{2}\right)=0$$

Получим

$$
\begin{aligned}
&A_1e^{-ik_1\frac{d}{2}}+B_1e^{ik_1\frac{d}{2}}-A_2e^{-k_2\frac{d}{2}}-B_2e^{ik_2\frac{d}{2}}=0\\
&A_2e^{ik_2\frac{d}{2}}+B_2e^{-k_2\frac{d}{2}}-A_3e^{ik_3\frac{d}{2}}-B_3e^{-ik_3\frac{d}{2}}=0\\
&A_1\frac{ik_1}{m_2^*}e^{-ik_1\frac{d}{2}}-B_1\frac{ik_1}{m_2^*}e^{ik_1\frac{d}{2}}-A_2\frac{ik}{m_1^*}e^{-k_2\frac{d}{2}}+B_2\frac{ik_2}{m_1^*}e^{ik_2\frac{d}{2}}=0 \qquad (5)\\
&A_2\frac{ik_2}{m_1^*}e^{ik_2\frac{d}{2}}-B_2\frac{ik_2}{m_1^*}e^{-ik_2\frac{k_2d}{2}}-A_3\frac{ik_3}{m_2^*}e^{ik_3\frac{d}{2}}+B_3\frac{ik_3}{m_2^*}e^{-k_3\frac{d}{2}}=0\\
&A_1e^{-ik_1\frac{D}{2}}+B_1e^{ik_1\frac{D}{2}}=0 \qquad A_3e^{ik_3\frac{D}{2}}+B_3e^{-k_3\frac{D}{2}}=0 \qquad A_3e^{ik_3\frac{D}{2}}+B_3e^{-ik_3\frac{D}{2}}=0
\end{aligned}
$$

Здесь $B_1=-A_1e^{-ik_1D}$, $B_3=-A_3e^{ik_3D}$

Учитывая симметрию формы квантовой ямы, имеем

$\psi(z=0)=0$ (для четных состояний)

$\psi(z=0)=0$ (для нечетных состояний)

Рассмотрим четные состояния

$$\psi=A_2e^{ikz}+B_2e^{-k_2z} \qquad (6)$$

$$\psi=k_2A_2e^{ik_2z}-k_2B_2e^{-k_2z} \qquad (7)$$

Из условия (7) получим $A_2=B_2$, откуда из (5) находим следующее соотношение

$$
\begin{aligned}
&A_1\left(e^{-ik_1\frac{d}{2}}-e^{-ik_1D}.e^{-ik_1\frac{d}{2}}\right)-2A_2\cos k_2\frac{d}{2}=0\\
&2A_2\cos k_2\frac{d}{2}+A_3\left(e^{ik_1D}.e^{-ik_1\frac{d}{2}}-e^{ik_1\frac{d}{2}}\right)=0 \qquad (8)\\
&\frac{A_1k_1}{m_2^*}\left(e^{-ik_1\frac{d}{2}}+e^{-ik_1D}.e^{ik_1\frac{d}{2}}\right)+\frac{2k_2i}{m_1^*}A_2\sin k_2\frac{d}{2}=0\\
&A_2\frac{2ik_2}{m_1^*}\sin k_2\frac{d}{2}-A_3\frac{k_1}{m_2^*}\left(e^{ik_1\frac{d}{2}}+e^{ik_1D}.e^{-ik_1\frac{d}{2}}\right)=0
\end{aligned}
$$

Таким образом, из (3) не трудно получить трансцендентные уравнения для определения разрешенных значений энергии $E_z>0$.

Для четных состояний $ctgk_2\frac{d}{2}=+\frac{m_2^*}{m_1^*}\frac{k_2}{k_1}tg(k_1(D-d))$ (9)

Для нечетных состояний $tg(k_2\frac{d}{2}) = -\frac{m_2^* k_2}{m_1^* k_1}\cdot tg\left(k_1\left(b-\frac{d}{2}\right)\right)$ (10)

Далее найдем разрешенные уровни радиального движения в потенциальной яме вида

$$U(\rho) = \begin{cases} -U_0, \rho < R, \\ 0, \rho > R \end{cases}$$

В цилиндрической системе координат гамильтониан имеет вид

$$\widehat{H} = \frac{\hbar^2}{2m_{1,2}^*}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right] + U(\rho)$$

С учетом цилиндрической симметрии задачи, радиальное движение описывается уравнением Шредингера (после разделения переменных),

$$\frac{-\hbar^2}{2m_{1,2}^*}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right) - \frac{m^2}{\rho^2}\right]\chi_{n_\rho,m}(\rho) + U(\rho)\chi_{n_\rho,m}(\rho) = E_{n_\rho,m}\cdot\chi_{n_\rho,m}(\rho)$$

Так что собственные функции гамильтониана $\widehat{H}$

$$\psi_{n_\rho,m,n_z}(\rho,\varphi,z) = \psi_{n_z}\cdot\chi_{n_\rho,m}(\rho)$$

В области 2 (квантовой точки)

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1^*}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial\chi}{\partial\rho} + \frac{\partial^2\chi}{\partial\rho^2} - \frac{m^2}{\rho^2}\chi\right] - U_0\cdot\chi = E_{n_\rho,m}\cdot\chi, \rho < R$$

В областях 1 и 3

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2^*}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial\chi}{\partial\rho} + \frac{\partial^2\chi}{\partial\rho^2} - \frac{m^2}{\rho^2}\chi\right] = E_{n_\rho,m}\cdot\chi, \rho \geq R.$$

Обозначим $r = \sqrt{\frac{2m_2^*\cdot\left|E_{n_\rho m}\right|}{\hbar^2}}$, $p = \sqrt{\frac{2m_1^*\left(U_0 + \left|E_{n_\rho,m}\right|\right)}{\hbar^2}}$, $t = r\rho$, $s = pR$

В итоге приходим к соответствующим уравнениям

при $\rho \geq R$ $\frac{\partial^2\chi}{\partial t^2} + \frac{1}{t}\frac{\partial\chi}{\partial t} + \left(1 - \frac{m^2}{t^2}\right)\chi = 0,$ и при $\rho < R$ $\frac{\partial^2\chi}{\partial s^2} + \frac{1}{s}\frac{\partial\chi}{\partial s} + \left(1 - \frac{m^2}{s^2}\right)\chi = 0,$

$\chi = C_1 I_m(r\rho) + C_2 N_m(r\rho)$ $\chi = C_3 I_m(p\rho) + C_4 N_m(p\rho)$

где _функции Бесселя и Неймана. Исходя из условия конечности волновой функции, при $\rho = 0$ следует, что $C_2 + C_4 = 0$.

Вне потенциальной ямы квантовой точки для состояний с в качестве решения уравнения (2) служат цилиндрические функции мнимого аргумента (функции Макдональдса).

То есть при $\rho \geq R$ $\chi = C_1 K_m(r\rho)$

Напишем условия непрерывности плотности вероятности и плотности потока вероятности в точке $\rho = R$

$$\begin{cases} c_1 K_m(\kappa R) = c_3 I_m(pR) \\ c_1 \dfrac{1}{m_2^*} K_m'(\kappa\rho)\big|_{\rho=R} = c_3 \dfrac{1}{m_1^*} I_m'(p\rho)\big|_{\rho=R} \end{cases}$$

Решения последней системы определяют дискретный спектр в квантовой точке.
Рассмотрим решение последней системы при m=0. В случае неглубокой ямы

$$\xi = \frac{m_1^* U_0 R^2}{\hbar^2} \ll 1, \eta = \frac{m_2^*|E_{n_\rho,m}|R^2}{\hbar^2} \ll 1,$$

$$I_0(x) \approx 1, I_0'(x) \approx \frac{x}{2}, K_0(x) \approx -\ln\frac{x}{2}, K_0'(x) \approx -\frac{1}{x}$$

при $x \ll 1$ $\quad \dfrac{K_m(\kappa R)\cdot m_2^*}{\kappa \cdot K_m'(\kappa\rho)\big|_{\rho=R}} = \dfrac{I_m(pR)\cdot m_1^*}{p I_m'(p\rho)\big|_{\rho=R}}$

или

$$\frac{K_m\left(\sqrt{\dfrac{2m_2^*\cdot|E_{n_\rho,m}|R^2}{\hbar^2}}\right)}{\sqrt{\dfrac{2m_2^*|E_{n_\rho,m}|}{\hbar^2}}\cdot K_m'\left(\dfrac{2m_2^*|E_{n_\rho,m}|R^2}{\hbar^2}\right)} = \frac{I_m\left(\dfrac{2m_1^*(V_0+|E_{n_\rho,m}|)R^2}{\hbar^2}\right)}{\sqrt{\dfrac{2m_1^*(V_0+|E_{n_\rho,m}|)}{\hbar^2}}\cdot I_m'\left(\sqrt{\dfrac{2m_1^*(V_0+E_{n_\rho,m})R^2}{\hbar^2}}\right)}\cdot\frac{m_1^*}{m_2^*}.$$

Учитывая, что $|E_{n_\rho,m}|_{n_\rho=0,m=0} \ll V_0$, получим

$$-\frac{\ln\left(\dfrac{2}{\sqrt{\dfrac{2m_2^*|E_{00}|R^2}{\hbar^2}}}\right)\sqrt{\dfrac{2m_2^*|E_{00}|R^2}{\hbar^2}}}{\sqrt{\dfrac{2m_2^*|E_{00}|}{\hbar^2}}} = -\frac{2}{\sqrt{\dfrac{2m_1^*(V_0+|E_{00}|R^2)}{\hbar^2}}\sqrt{\dfrac{2m_1^*(V_0+|E_{00}|)R^2}{\hbar^2}}}\frac{m_1^*}{m_2^*},$$

$$R\ln\frac{2}{\sqrt{\dfrac{2m_2^*|E_{00}|R^2}{\hbar^2}}} = \frac{2\dfrac{m_1^*}{m_2^*}}{\dfrac{2m_1^*(V_0+|E_{00}|)R}{\hbar^2}}, \frac{m_1^*(V_0+|E_{00}|)R^2}{\hbar^2}\cdot\ln\frac{2}{\sqrt{\dfrac{2m_2^*|E_{00}|R^2}{\hbar^2}}} = \frac{m_1^*}{m_2^*},$$

$$\ln\frac{2}{\sqrt{\dfrac{2m_2^*|E_{00}|R^2}{\hbar^2}}} = \frac{\hbar^2}{U_0R^2m_2^*}, \sqrt{\frac{m_2^*|E_{00}|R^2}{2\hbar^2}} = \exp\left(-\frac{\hbar^2}{U_0R^2m_2^*}\right)$$

$$E_{00} = -\frac{2\hbar^2}{m_2^* R^2}\exp\left(-\frac{2\hbar^2}{U_0 R^2 m_2^*}\right).$$

Соответствующая волновая функция внутри квантовой ямы

$$\chi = c_3 I_m(p\rho) = c_3 I_0(p\rho), \quad \text{где} \quad p = \sqrt{\frac{2m_1^*(U_0 + E_{00})}{\hbar^2}}.$$

Из условия нормировки $c_3^2 \int_0^R I_m^2(p\rho)\rho\, d\rho = c_3^2 \frac{\rho}{2}\left[I_m^2(p\rho) - I_{m-1}(p\rho)\cdot I_{m+1}(p\rho)\right]\Big|_0^R$

С учетом рекуррентного соотношения $I_{m-1}(p\rho) - I_{m+1}(p\rho) = \frac{2m}{p\rho} I_m(p\rho)$,

имеем

$$\int_0^R I_m^2(p\rho)\rho\, d\rho = \frac{\rho}{2}\left[I_m^2(p\rho) - I_{m+1}^2(p\rho) - \frac{2m}{p\rho} I_m(p\rho)\cdot I_{m+1}(p\rho)\right]\Big|_0^R$$

$$= \frac{R^2}{2}\left[I_m^2(pR) - I_{m+1}^2(pR) - \frac{2m}{pR} I_m(pR) I_{m+1}(pR)\right]$$

$$c_3 = \frac{\sqrt{2}}{R}\left(I_m^2(pR) - I_{m+1}^2(pR) - \frac{2m}{pR} I_m(pR)\cdot I_{m+1}(pR)\right)^{-\frac{1}{2}}$$

при m=0 $c_3 = \frac{\sqrt{2}}{R}\left(I_0^2(pR) - I_1^2(pR)\right)^{-\frac{1}{2}}$, где $p = \sqrt{\frac{2m_1^*(U_0 + E_{00})}{\hbar^2}}$.

3. Таким образом, энергия основного состояния $E_{000} = E_0 + E_{00}$, где E_0-энергия основного состояния для движения электрона на оси z, которое получается при решении уравнения (4), а E_{00}-энергия основного состояния (11), соответствующего движению, поперечному к оси цилиндра.

Видно, что энергия основного состояния E_{000} заглубляется в зависимости от радиуса цилиндра, что может привести к красному смещению энергии основного перехода E_{000} в квантовых точках. Отметим, что красное смещение энергии основного перехода принимает максимальное значение при $R_0 = (2\hbar/U_0 m_2^*)^{1/2}$.

Литература

1. M.Grundmann, Physika, E 5, 167 (2000).
2. K.Nishi, H.Sano. et.al. Appl. Phys. Lett, 74, 1111 (1999).
3. Б.В.Воловик и др., ФТП 33, 990 (1999).
4. Н.Н.Леденцов и др., ФТП 32, 385 (1998).
5. Г.Г.Зегря и др., ФТП 37, 334 (2003).

Сведения об авторах:

Армен Алексанян - аспирант, кафедра общей и прикладной физики АрГУ
E-mail: alex.armen88@gmail.com
Карен Арамян – к.ф-м.н., профессор, декан физико-математического факультета АрГУ
E-mail: k_aramyan@rambler.ru
Грачиа Никогосян - к.ф.м.н., доцент, Гюмрийский государственный педагогический институт
E-mail: hrach1960@mail.ru
Ваге Буниатян - д.т.н. профессор, НПУА (НАЦИОНАЛЬНЫЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ АРМЕНИИ)
E-mail: vbuniat@seua.am

Статья рекомендована к печати членом редакционной коллегии, д.ф.м.н., А.М. Хачатряном.