

РОССИЙСКО-АРМЯНСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

Багдасарян Давид Артурович

Специальность: У.04.10 – Физика полупроводников

**ОБМЕННЫЕ ЭФФЕКТЫ И ОПТИЧЕСКОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ В
КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ И ШТРИХАХ**

**Диссертация на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук по специальности
У.04.10 - “Физика полупроводников”**

**Научный руководитель:
д. ф.-м. н., проф. Саркисян А.А.**

ЕРЕВАН 2018

Содержание

ВВЕДЕНИЕ.....	5
ГЛАВА I: ОБМЕННЫЕ ЭФФЕКТЫ В ДВУХЭЛЕКТРОННЫХ И ДИВАЛЕНТНЫХ ПРИМЕСНЫХ СИСТЕМАХ В ПАРАБОЛИЧЕСКИХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ.....	14
1.1 Введение	14
1.2 Двухэлектронные состояния в сферической квантовой точке.....	17
1.1.1 Оценка энергии основного состояния параболического атома гелия.....	18
1.1.2 Определение энергии основного состояния в рамках теории возмущений ..	19
1.1.2 Обменный интеграл и время обмена состояниями	23
1.3 Дивалентные примесные состояния в параболической квантовой точке	26
1.3.1 Оценка энергии основного состояния с помощью метода соотношения неопределенностей.....	26
1.3.2 Одноэлектронная проблема в рамках вариационного метода	27
1.3.3 Расчет поправки энергии электронного взаимодействия в основном состоянии.....	29
ГЛАВА II: ОПТИЧЕСКИЕ И ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КВАНТОВЫХ ШТРИХОВ.....	34
2.1 Введение	34
2.2 Оптическая визуализация пифагоровых троек в квантовом штрихе в форме параллелепипеда	36
2.2.1. Электронные состояния	36
2.2.2. Оптическое межзонное поглощение	41
2.3 Определение мультипольных поправок к полю, создаваемому электроном, локализованным в квантовом параллелепипеде.....	45

2.4 Межзонные переходы в квантовом штрихе в форме усеченной призмы.....	46
2.4.1. Режим сильного размерного квантования.....	46
2.4.2 Режим промежуточного размерного квантования.....	50
2.4.3. Режим слабого размерного квантования.....	53
2.4.4. Оптические свойства.....	54
ГЛАВА III: ОПТИЧЕСКИЕ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЛОИСТЫХ И ТОРОИДАЛЬНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК	55
3.1 Введение	55
3.2 Межзонное поглощение и экситонные эффекты в слоистых сферических квантовых точках	58
3.3 Квантовый сферический слой со смещенной от центра примесью	68
3.3.1 Режим сильного размерного квантования.....	68
3.3.2 Режим промежуточного размерного квантования.....	72
3.3.3 Двухчастичная корреляционная функция.....	72
3.3.4 Сечение фотоионизации	75
3.3.5 Дипольный и квадрупольный моменты сферического слоя со смещенной от центра примесью.....	78
3.4 Экситонные состояния и прямое межзонное поглощение света в ансамбле тороидальных квантовых точек	80
3.4.1 Электронные состояния	81
3.4.2 Оптическое поглощение	87
3.5 Тепловые и магнитные свойства электронного газа в тороидальной квантовой точке	89
ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ	96

ДОПОЛНЕНИЕ	98
ЛИТЕРАТУРА.....	102
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ В ДИССЕРТАЦИИ СОКРАЩЕНИЙ.....	111
СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ.....	112
БЛАГОДАРНОСТИ.....	113

ВВЕДЕНИЕ

Квантовые точки (КТ) или «искусственные атомы» представляют собой наноразмерные полупроводниковые частицы, настолько малые, что их оптические и электронные свойства отличаются от свойств объемного полупроводника [1,3]. КТ являются связующим звеном между молекулярными кластерами и объемными материалами [2] и содержат от нескольких сот до нескольких тысяч атомов. В последние два десятилетия КТ стали объектом всесторонних как теоретических, так и экспериментальных исследований (см., например, [1-5]).

Внимание к таким структурам изначально было обусловлено быстрым развитием полупроводниковых технологий [1,2,3,6,7]. Так, начиная с 1980-х годов значительные усилия были направлены на получение полупроводниковых КТ, которые обеспечивают квантование энергий носителей заряда (НЗ) во всех трех направлениях. Полупроводниковые КТ были выращены различными физическими и химическими методами [2,6]. Первоначально применялись такие методы, как литографическое структурирование и травление структур с квантовыми ямами (такие как электронно - лучевая литография, лучевая литография ионов), однако позднее важными стали методы самоорганизованного роста КТ и получение коллоидальных наноструктур [7,9]. На сегодняшний день основными физическими методами получения КТ являются молекулярно-лучевая эпитаксия (МЛЭ) (Molecular Beam Epitaxy) и осаждение металлорганических соединений из газовой фазы (МОСГФ) (Metalorganic chemical vapour deposition), а также метод пар-жидкость-кристалл [1,2]. В последние два десятилетия бурно развиваются низкоэнергетические (в отличие от литографических методов) методы коллоидного химического синтеза кристаллических полупроводниковых наночастиц, а также самоорганизация упорядоченных наноструктур на кристаллических поверхностях. Важно отметить, что самоорганизация КТ может самопроизвольно зарождаться в процессе МЛЭ и МОСГФ, когда параметры материала КТ существенно отличаются от параметров подложки. Получаемые при этом напряжения создают когерентно напряженные острова. Этот способ роста известен как метод Странски-Крастанова [10].

Как отмечалось выше, КТ представляют собой трехмерные кристаллические наноразмерные блоки полупроводникового материала, встроенные в матрицу другого

материала или выращенные на поверхности подложки. Поскольку их характерные размеры сопоставимы с эффективной длиной волны де Бройля НЗ в полупроводнике, они требуют полного квантомеханического рассмотрения. В основе описания КТ лежат принципы физики твердого тела, которые были разработаны в середине прошлого века. Кристалл концептуально можно рассматривать как бесконечно протяженную физическую систему, которая формируется путем периодического повторения элементарной ячейки. Элементарная ячейка является наименьшей строительной единицей, которая содержит всю симметрию и структурную информацию о материале кристалла. Для описания кристалла как физической системы необходимо решить уравнение Шредингера, где волновая функция кристалла зависит от координат всех электронов и ядер. Однако, даже сравнительно небольшой объем кристалла содержит огромное число частиц, поэтому невозможно решить такую проблему точно без введения дополнительных предположений. Различие в характерных скоростях движения электронов и ядер может быть использовано для отделения их движения в так называемом приближении Борна-Оппенгеймера. Помимо этого, только валентные электроны способны двигаться в объеме кристалла и поэтому остальные электроны могут не рассматриваться. Далее, используя одноэлектронное приближение, которое позволяет отделить межэлектронное взаимодействие, предполагая, что электрон движется в усредненном потенциале, созданном всеми другими электронами, возможно прийти к одноэлектронному уравнению Шредингера. Отсюда, принимая во внимание периодичность кристалла, можно сделать важный вывод (теорема Блоха), что электронная волновая функция может быть записана как произведение блоховской функции, которая отражает структуру и симметрию кристаллического потенциала, и огибающей функции, несущей информацию об импульсе электрона. Если НЗ ограничены в системах с пониженной размерностью, таких как КТ, имеющие размеры порядка длины волны де Бройля, то появляются квантовые эффекты, а именно квантование энергии приводит к дискретному характеру энергетических уровней как в валентной, так и в зоне проводимости – это явление называется размерным квантованием (РК) [1,3].

Модели описания низкоразмерных наноструктур можно разделить на два класса: атомистические теории, такие как эмпирическая теория псевдопотенциала [8], которые имитируют вклад каждого отдельного атома КТ, и континуальные подходы, такие как

$\vec{k} \cdot \vec{p}$ теории [3], которые абстрагируются от атомистической природы и рассматривают только макроскопический потенциал, называемый ограничивающим. Наиболее часто используемой теорией описания КТ является теория огибающей функции или $\vec{k} \cdot \vec{p}$ теория (приближение эффективной массы), разработанная, в частности, Бастардом, использующая периодические блоховские функции как базис для построения волновой функции КТ. Несмотря на то, что КТ представляют собой сложные трехмерные структуры, приближение эффективной массы очень хорошо описывает их свойства. Схематически огибающая волновая функция и кристаллический потенциал изображены на Рис. В.1.

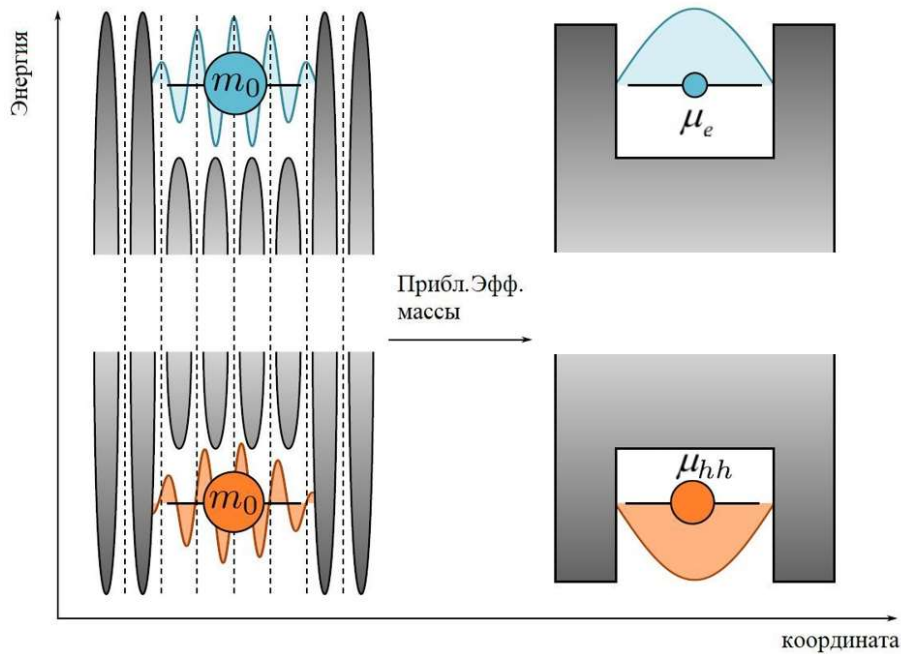


Рис. В.1. Физическая интерпретация приближения эффективной массы. Потенциал кристалла (слева) переходит в параметр - эффективную массу (справа). m_0 - масса электрона, μ_e - эффективная масса электрона.

С математической точки зрения определение спектра энергии и волновой функций в наноструктуре с использованием приближения эффективной массы сводится к решению следующего уравнения Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \left\{ \Delta + V_{lattice}(\vec{r}) + V_{conf}(\vec{r}) \right\} \Psi_{tot}(\vec{r}) = E \Psi_{tot}(\vec{r}), \quad (B.1)$$

где $V_{lattice}(\vec{r})$ - периодическая быстро осциллирующая потенциальная энергия решетки, описывающая взаимодействие НЗ с кристаллической решеткой. Поскольку потенциальная энергия решетки изменяется в гораздо меньших масштабах, чем ограничивающий потенциал $V_{conf}(\vec{r})$, то полную волновую функцию можно представить в виде произведения огибающей волновой функции $\Psi(\vec{r})$, (далее ее будем называть просто волновой функцией) и быстро осциллирующей блоховской функции $\Phi_{Bloch}(\vec{r})$.

$$\Psi_{tot}(\vec{r}) = \Psi(\vec{r})\Phi_{Bloch}(\vec{r}). \quad (B.2)$$

Для количественного описания поведения НЗ в низкоразмерных наноструктурах, важно знать функцию плотности состояний (ФПС) электрона $g(E)$, показывающую количество состояний в единичном энергетическом интервале. Дискретный характер уровней энергий влияет на вид ФПС. Как известно, для структур различной размерности соответствующие ФПС электрона имеют различные виды. В нульмерной системе она представляет собой последовательность дельта-функций [1,3]:

$$g_{0D}(E) = \sum_{\nu} \delta(E - E_{\nu}), \quad (B.3)$$

где E_{ν} - уровни энергии КТ, ν - совокупность квантовых чисел.

Отметим, что в последние годы удалось получить КТ различных форм и размеров: сферические, эллипсоидальные, конические, линзообразные и пирамидальные, а также были выращены так называемые квантовые штрихи (КШ), имеющие форму усеченной призмы или параллелепипеда [1,6,11-15]. Также стало возможным получать монодисперсные ансамбли КТ высокого качества [6]. При этом огромный потенциал для будущих технологических применений КТ обусловлен бурным развитием технологий, в которых КТ рассматриваются в качестве перспективных кандидатов на роль элементной базы для приборов нового поколения вплоть до промышленных применений в области создания дисплеев на основе КТ [16]. В частности, они могут быть использованы в чипах памяти нового поколения [17-20], при создании кубитов на основе электронных и спиновых состояний [21], при создании приборов квантовой криптографии [22], а также возможно их применение для создания одноэлектронного транзистора [23,24]. Другим важным применением КТ являются

оптические приборы, такие как низкотемпературные лазеры [25-27] а также светодиоды [28-30] на основе КТ. Соответственно, теоретическое исследование оптических свойств КТ является актуальной проблемой, так как предсказанные характеристики многих оптических приборов могут быть значительно улучшены, если в качестве элементной базы будут использованы низкоразмерные наноструктуры.

Большое количество работ как теоретического, так и экспериментального характера посвящены описанию электронных и оптических характеристик КТ [1,2,31,32]. Вместе с тем, в задачах, связанных с применением КТ в квантовой информатике и спинтронике, может возникнуть класс интересных проблем, связанных с изучением обменных эффектов в двухэлектронных и дивалентных примесных системах, локализованных в КТ. Ранее было показано, что обменным взаимодействием в КТ возможно управлять путем изменения её геометрических размеров [33,34]. С другой стороны, объектом пристального изучения стали квантовые штрихи (КШ) и кольцеобразные КТ [15,35]. Наряду с примесными и обменными эффектами большой интерес вызывают исследование межзонного оптического поглощения, а также изучение диамагнетизма слабо взаимодействующего газа в кольцеобразных наноструктурах. Кольцеобразные структуры примечательны тем, что имеется возможность наблюдать в них интересные эффекты, такие как эффект Ааронова-Бома, о котором пойдет речь в третьей главе. Традиционно, кольцеобразные наноструктуры с циклической симметрией моделируются как двумерные цилиндрические слои. Однако более реалистичной геометрией является геометрия тора. Такие объекты требуют детального математического моделирования при теоретическом описании физических процессов, происходящих в них. Именно поэтому вызывает интерес изучение оптических и термодинамических свойств указанных систем.

Вышеуказанным проблемам посвящена предлагаемая диссертационная работа. Вкратце представим содержание глав диссертации.

В первой главе диссертации, в рамках стационарной теории возмущений, рассматриваются двухэлектронные состояния в параболической КТ при наличии и в отсутствие примеси. По аналогии с теорией атома гелия исследуется «параболический атом гелия», при этом проводится также оценка энергии основного состояния с помощью соотношения неопределенности Гейзенберга. Рассчитывается время обмена состояниями в том числе и в присутствии примесного центра.

Во второй главе исследуются особенности энергетического спектра и оптическое поглощение в КШ. Рассматриваются трехкратно вырожденные состояния в квантовом параллелепипеде, описываемые пифагоровыми тройками, а также оптические межзонные переходы, обусловленные указанным вырождением. Также рассматриваются КШ в форме усеченной призмы в различных режимах РК.

Третья глава посвящена исследованию электронных, экситонных, оптических и статистических свойств слоистых и кольцеобразных КТ. Рассматриваются оптические свойства сферического квантового слоя, а также эффекты фотоионизации смещённой от центра примеси. Исследуется оптическое межзонное поглощение и статистические свойства слабозаимодействующего электронного газа в КТ, имеющей форму тороида.

Заметим, что в настоящей работе длины измеряются в эффективных радиусах Бора $a_B = \hbar^2 \varepsilon / \mu_e e^2$, а энергия - в эффективных постоянных Ридберга $E_R = \hbar^2 / 2\mu_e a_B^2$, где μ_e - эффективная масса электрона, ε - диэлектрическая проницаемость материала КТ.

Цель работы

Целью предлагаемой диссертационной работы является:

- исследование обменных эффектов в двухэлектронных параболических КТ, в том числе при наличии примесного центра.
- выявление особенностей характера межзонного оптического поглощения в КШ, а также фотоионизации примеси в сферических нанослоях.
- изучение термодинамических и магнитных характеристик тороидальных КТ.

Научная новизна

- Исследован характер зависимости времени обмена состояниями в параболической КТ сферической формы как при наличии, так и в отсутствие примеси.
- Изучено межзонное оптическое поглощение в КШ, имеющих форму параллелепипеда и усеченной призмы. Продемонстрирована теоретическая возможность оптической «визуализации» пифагоровых троек в ансамбле КШ.
- Выявлен характер межзонного оптического поглощения, а также фотоионизации смещенного примесного центра в сферических слоистых наноструктурах.
- Рассмотрены задачи определения коэффициента межзонного поглощения, а также изучены термодинамические и магнитные свойства электронного газа, локализованного в тороидальных КТ.

Научная и практическая ценность

Полученные в диссертации результаты, помимо академического интереса, имеют также практическое значение. Они могут быть использованы при проектировании полупроводниковых приборов нового поколения. В частности, лазеров дальнего инфракрасного диапазона на КТ, одноэлектронных транзисторов, светодиодов на КТ и т. д. На основе анализа спектров поглощения и излучения изучаемых систем можно получить информацию об их зонном строении, а также дисперсии по их геометрическим размерам.

Основные научные положения, выносимые на защиту

1. Для двухэлектронной КТ сферической формы с параболическим потенциалом ограничения время обмена состояниями с увеличением размера КТ растет, и зависимость от ее радиуса носит линейный характер.
2. В спектре энергии тонкого КШ, имеющего форму параллелепипеда с квадратным сечением, существует семейство трехкратно вырожденных уровней, описываемых

пифагоровыми тройками. При этом переход от одной пифагоровой тройки к другой описывается модулярной группой $\Gamma(2)$.

3. В случае межзонных переходов в КШ формы тонкого прямоугольного параллелепипеда с квадратным сечением, наличие трехкратно вырожденных уровней позволяет теоретически реализовать оптическую «визуализацию» пифагоровых троек.
4. Максимальная интенсивность пиков спектра фотоионизации примеси, смещенной от центра сферического нанослоя, реализуется, когда примесь в радиальном направлении находится посередине нанослоя.
5. Слабо взаимодействующий электронный газ, локализованный в тороидальной КТ, проявляет ярко выраженные диамагнитные свойства.

Апробация работы

Основные результаты диссертационной работы обсуждались во время научных семинаров кафедры Общей физики и квантовых наноструктур Института Математики и высоких технологий РАН, а также докладывались на следующих научных конференциях:

- 10 Юбилейная годовичная научная конференция РАН 30.11- 4.12 2015.
- 17-я Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике, Россия, Санкт-Петербург, 23 - 27 ноября 2015 г.
- 11 Годичная научная конференция 5-9, 12, 2016, РАН.
- 4th International Symposium “OPTICS and its Applications” (OPTICS-2016) Yerevan and Ashtarak, Armenia, July, 25-28.
- International Optical Metrology, Congress Center Munich, Germany, 25 – 29, June 2017.
- 12 Годичная научная конференция РАН, посвященная 20 летию основания РАН. 7-8, 12, 2017.

Публикации

По теме диссертации опубликовано 8 работ. Список приводится в конце диссертационной работы.

Гранты

По теме “Исследование несколько/много частичных и оптических свойств полупроводниковых квантовых нанослоев” был получен грант в рамках “Программы поддержки аспирантов”, объявленной Государственным Комитетом Республики Армения.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка используемой литературы. Текст изложен на 113 страницах и содержит 41 рисунков, 9 таблиц и 111 наименований литературы.

ГЛАВА I: ОБМЕННЫЕ ЭФФЕКТЫ В ДВУХЭЛЕКТРОННЫХ И ДИВАЛЕНТНЫХ ПРИМЕСНЫХ СИСТЕМАХ В ПАРАБОЛИЧЕСКИХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

1.1 Введение

Исследование несколько- и многочастичных состояний в КТ является важной задачей физики наноструктур. Электрон-электронное взаимодействие может играть в таких системах принципиально важную роль. Характерной особенностью многоэлектронных систем является наличие обменного взаимодействия [33,34,36,37]. При этом, в КТ возможно проводить достаточно гибкую и прецизионную манипуляцию кулоновского и обменного взаимодействий. Это делает их очень интересными физическими системами, поскольку они позволяют изучать эффекты корреляции, одновременно подвергая их контролю [38].

Проблема теоретического изучения двухэлектронных состояний в нульмерных структурах, помимо сугубо академического, имеет также прикладное значение. Манипуляция энергетическими состояниями может быть использована при создании полупроводниковых нанoeлектронных приборов нового поколения. Вместе с тем, в таких структурах имеется возможность протестировать фундаментальные квантовомеханические принципы.

С математической точки зрения задача двух электронов, находящихся в КТ, идентична проблеме атома гелия, однако здесь локализация электронов обусловлена не притягивающим кулоновским полем ядра, а отталкивающим потенциалом ограничения стенок. Это обстоятельство существенно отличает искусственный атом гелия от реального, так как позволяет управлять уровнями энергии двухэлектронной системы путём изменения геометрических размеров и формы КТ.

Одной из первых статей, посвященной двухэлектронным состояниям в КТ, была работа [39], где авторами рассматривались дискретные уровни энергии двух электронов в зависимости от размеров КТ и величины магнитного поля, приложенного перпендикулярно её плоскости. В работе [40] в самосогласованном приближении были рассчитаны энергетические уровни параболической КТ, содержащей до 10 электронов. Показывалось, что гармонический потенциал ограничения является хорошим

приближением, описывающим реальные структуры. Корреляционная энергия взаимодействия и структура энергетических уровней относительного движения двух электронов, локализованных в КТ, были изучены в работе [41], используя квазиклассическое приближение. Были получены простые аналитические выражения, хорошо согласующиеся с результатами точных численных решений. Авторы [42] исследовали спектр энергии и волновые функции двухэлектронных состояний в КТ, используя разложение волновой функции в степенной ряд. На основе метода $1/N$ разложения, авторы работы исследовали относительное движение электронов в двухэлектронной КТ [43]. Были объяснены интересные особенности спектров таких структур, в частности, эффекты пересечения уровней энергии и снятие вырождения. Сравнение различных методов описания двухэлектронных состояний в параболической КТ было проведено в [44]. На основе методов Хартри-Фока и Кона-Шама, а также численного решения уравнения Шредингера, были получены значения энергий двухэлектронной системы, а также приведены сравнения результатов, полученных на основе указанных методов. Наконец были предложены интерполяционные формулы зависимостей энергии от размеров КТ.

Авторами работы [45] были рассчитаны низкоэнергетические уровни двухэлектронной КТ при наличии внешнего однородного магнитного поля в рамках вариационного метода. В работе [46] авторами были исследованы структурные переходы симметрии в двухэлектронной КТ под воздействием перпендикулярно приложенного магнитного поля. В [47] было проведено исследование влияния магнитного поля на спектр электронов в КТ. Наличие межэлектронного взаимодействия оказывает существенное влияние на характер спектра энергии многоэлектронной системы как в отсутствие, так и при наличии магнитного поля. Однако, когда потенциал ограничения квадратичен, согласно обобщенной теореме Кона, энергии оптического возбуждения многочастичных систем точно такие же, как у одного электрона [47]. Это затрудняет непосредственное наблюдение эффектов электрон-электронного взаимодействия. С другой стороны, эффекты, связанные с электрон-электронным взаимодействием, можно обнаружить путем измерения термодинамических свойств электронов, что было теоретически показано в [47].

Наряду с двухэлектронными, в КТ интенсивно изучались примесные состояния (см., например, [48-52]). Наличие РК во всех трех направлениях приводит к

принципиально новому характеру энергетического спектра водородоподобной примеси, локализованной в КТ. Важным фактором, влияющим на свойства кулоновских систем в наноструктурах, является наличие конкуренции между кулоновским и размерным квантованиями. Ярким примером являются примесные состояния в сферической КТ. Как показано в [48], полная энергия примеси, находящейся в центре КТ, может быть как отрицательной, так и положительной. Это является следствием доминирования РК в случае КТ небольших радиусов, и кулоновского для КТ, имеющих большие радиусы. При этом энергия связи примеси требует дополнительного уточнения и определяется как разность между энергиями электрона, локализованного в КТ, и полной энергии при наличии примеси. В научной литературе в основном рассматриваются одноэлектронные примеси. В частности, в работе [49] изучалась энергия связи водородных примесных состояний в сферической КТ при помощи вариационного метода. Позже тем же автором были рассчитаны энергии связи водородоподобных примесных состояний в сферических КТ с параболическим потенциалом ограничения в рамках теории возмущений [50]. В работе [51] были изучены примесные состояния в КТ с параболическим потенциалом ограничения под действием сильного магнитного поля. Используя точные численные схемы диагонализации, авторы работы [52] получили спектры энергии двухэлектронных КТ с параболическим потенциалом ограничения как в присутствии кулоновской примеси, локализованной в центре КТ, так и при наличии однородного магнитного поля. Наличие кулоновского поля примеси является дополнительным локализирующим электроны фактором. Примечательно, что при больших радиусах КТ данная система будет аналогична атому гелия, а в противоположном случае малых радиусов данная система по своим свойствам будет аналогична двухэлектронной системе в КТ.

В двухэлектронной квантовой системе помимо кулоновского присутствует обменное взаимодействие между электронами, которое отвечает за обмен состояниями между ними и является чисто квантовым эффектом, не имеющим аналога в классической физике. При этом из общих соображений можно показать [33], что время обмена состояниями определяется обменным интегралом, которое в КТ можно манипулировать за счет изменения геометрических параметров КТ. В этой связи вызывает интерес исследование эффекта обмена состояниями в параболической КТ,

содержащей два электрона («параболический атом гелия»). В подобной системе путем изменения частоты ограничивающего можно манипулировать временем обмена состояниями.

1.2 Двухэлектронные состояния в сферической квантовой точке

В данном разделе рассматриваются двухэлектронные состояния в КТ со сферически симметричным параболическим потенциалом ограничения. (Рис 1.1)

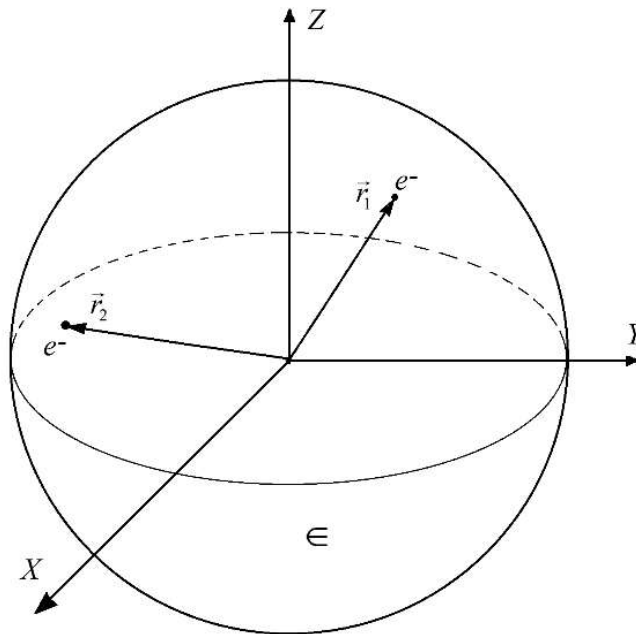


Рис. 1.1. Двухэлектронные состояния в сферической КТ.

Рассмотрим стационарное уравнение Шредингера:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \quad (1.1)$$

характеризуемое следующим гамильтонианом:

$\hat{H} = \sum_{i=1}^2 \hat{H}_i + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, где $\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla}_i^2 + V_{conf}(r_i)$ - одноэлектронный гамильтониан в параболической КТ, $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{e^2}{\epsilon |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$ - оператор энергии взаимодействия электронов, \vec{r}_1, \vec{r}_2 - координаты первого и второго электронов соответственно, $\vec{\nabla}_i^2$ -

оператор Лапласа. $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ - волновая функция обеих частиц. Двухчастичную волновую функцию можно интерпретировать следующим образом: модуль её квадрата, умноженный на элемент объема в конфигурационном пространстве $d\tau$, можно трактовать как вероятность того, что первый электрон находится в окрестностях точки \vec{r}_1 с объемом $d\tau_1$, а второй - \vec{r}_2 с объемом $d\tau_2$.

Отметим, что наличие члена взаимодействия $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ приводит к тому, что переменные в уравнении Шредингера не разделяются. По этой причине, для учета взаимодействия электронов и корреляции их волновых функций, нужно прибегать к различным приближенным методам. Однако к определенным результатам можно прийти, сделав некоторые оценки.

1.2.1. Оценка энергии основного состояния параболического атома гелия

Запишем значение энергии двух электронов в параболической КТ:

$$E(r_1, r_2) = \frac{p_1^2}{2\mu} + \frac{p_2^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega^2 r_1^2}{2} + \frac{\mu\omega^2 r_2^2}{2} + \frac{e^2}{\varepsilon|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|}. \quad (1.2)$$

где μ - эффективная масса электрона, ε - диэлектрическая постоянная полупроводника, ω - частота ограничивающего потенциала, которая может быть оценена как $\omega \sim \frac{\hbar}{\mu R^2}$, $p_{1,2}$ - импульсы частиц. Заметим, что это выражение энергии

инвариантно по отношению к перестановке частиц местами. Следовательно, используя условия минимизации по r_1 и r_2 $\frac{dE}{dr_1} = 0$, $\frac{dE}{dr_2} = 0$ получим одно и то же значение r_{\min} .

Предположим, что электроны расположены диаметрально и имеют одинаковые импульсы $p_1 = p_2 = p$ и $r_1 = r_2 = r$. Для оценки энергии основного состояния воспользуемся соотношением неопределенностей Гейзенберга для координаты и импульса. Тогда для значения энергии получим следующее выражение:

$$E(r) \sim \frac{\hbar^2}{\mu r^2} + \mu\omega^2 r^2 + \frac{e^2}{2\varepsilon r}. \quad (1.3)$$

Минимизируя это выражение для определения r_{\min} , приходим к следующему уравнению четвертой степени:

$$\frac{r_{\min}^4}{R^4} - \frac{1}{4}r_{\min} - 1 = 0. \quad (1.4)$$

Аналитическое выражение решения этого уравнения громоздкое, поэтому зависимость $r_{\min}(R)$ была получена численным решением уравнения (1.4). Подставив зависимость $r_{\min}(R)$ в (1.3), найдем зависимость энергии основного состояния от радиуса КТ:

$$E_{\min} = 2 \left(\frac{1}{r_{\min}^2} + \frac{r_{\min}^2}{R^4} \right) + \frac{1}{r_{\min}}. \quad (1.5)$$

Данная зависимость приведена на Рис.1.2, где показана также энергия системы, рассчитанная в рамках теории возмущений. Рассмотрению основного состояния в рамках теории возмущений посвящен следующий параграф.

1.2.2 Определение энергии основного состояния в рамках теории возмущений

По аналогии с реальным атомом гелия рассмотрим энергию основного состояния "параболического атома гелия" в рамках стационарной теории возмущений. Будем рассматривать основное состояние системы, при котором оба электрона находятся в основных состояниях, но с различными спинами. В нулевом приближении двухчастичную волновую функцию можно представить в виде произведения одночастичных осцилляторных функций [53]:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2). \quad (1.6)$$

Подставляя (1.6) в уравнение Шредингера, приходим к двум уравнениям:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\vec{\nabla}_i^2\psi_i(\vec{r}_i) + \frac{\mu\omega^2 r_i^2}{2}\psi_i(\vec{r}_i) = E_i\psi_i(\vec{r}_i), \quad i = 1, 2. \quad (1.7)$$

Ввиду симметрии потенциала ограничения данное уравнение можно решать, как в декартовых [54], так и в сферических [55] координатах. В сферических координатах волновая функция представляется произведением радиальной на угловую функцию:

$$\psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)f(r), \quad (1.8)$$

где $Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$ - сферические функции, являющиеся собственными функциями оператора квадрата момента импульса [55]:

$$Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi(\ell+m)!}} P_{\ell}^m(\cos\theta) e^{im\varphi}, \quad (1.9)$$

где ℓ - орбитальное квантовое число ($\ell = 0, 1, \dots$), m - магнитное квантовое число ($-\ell \leq m \leq \ell$), $P_{\ell}^m(\cos\theta)$ - присоединенные многочлены Лежандра. Радиальная волновая функция может быть выражена при помощи вырожденной гипергеометрической функции первого рода:

$$f(r) = C_{n,\ell} r^{\ell} e^{\left(\frac{r^2}{2}\right)} {}_1F_1\left(-n, \ell + \frac{3}{2}, r^2\right), \quad (1.10)$$

где $C_{n,\ell}$ - нормировочный множитель, $n = 0, 1, 2, \dots$ - радиальное квантовое число, r - измеряется в радиусах Бора. Спектр энергии задается соотношением:

$$E_N = \hbar\omega \left(N + \frac{3}{2}\right), \quad (1.11)$$

где $N = 2n + l$ - главное квантовое число. В основном состоянии, согласно теории возмущений, поправка к энергии определяется следующим выражением:

$$E = 3\hbar\omega + \Delta V, \quad (1.12)$$

где ΔV - среднее значение оператора взаимодействия электронов. Среднее значение этого оператора может быть записано в виде:

$$\Delta V = \frac{e^2}{\varepsilon\pi^3 a_B} \int e^{-r_1^2 - r_2^2} \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} r_1^2 r_2^2 \sin\theta_1 \sin\theta_2 dr_1 dr_2 d\theta_1 d\theta_2 d\varphi_1 d\varphi_2. \quad (1.13)$$

Рассмотрим следующий множитель:

$$\frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} = \frac{1}{\sqrt{(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)^2}} = \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2(\vec{r}_2 \vec{r}_1)}}. \quad (1.14)$$

Направим \vec{r}_2 по оси z , тогда угол θ_1 будет углом между \vec{r}_1 и \vec{r}_2 . В силу сферической симметрии волновой функции основного состояния, запишем:

$$\Delta V = \frac{e^2}{\varepsilon\pi^3 a_B} \int e^{-r_1^2 - r_2^2} \frac{\sin\theta_1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta_1}} r_1^2 r_2^2 \sin\theta_2 dr_1 dr_2 d\theta_1 d\theta_2 d\varphi_1 d\varphi_2. \quad (1.15)$$

Вычислив этот интеграл, получим зависимость поправки энергии КТ ΔV от её радиуса (детали вычислений приводятся в дополнении).

$$\Delta V = 2\sqrt{2}\pi^{-1/2} \frac{1}{R}. \quad (1.16)$$

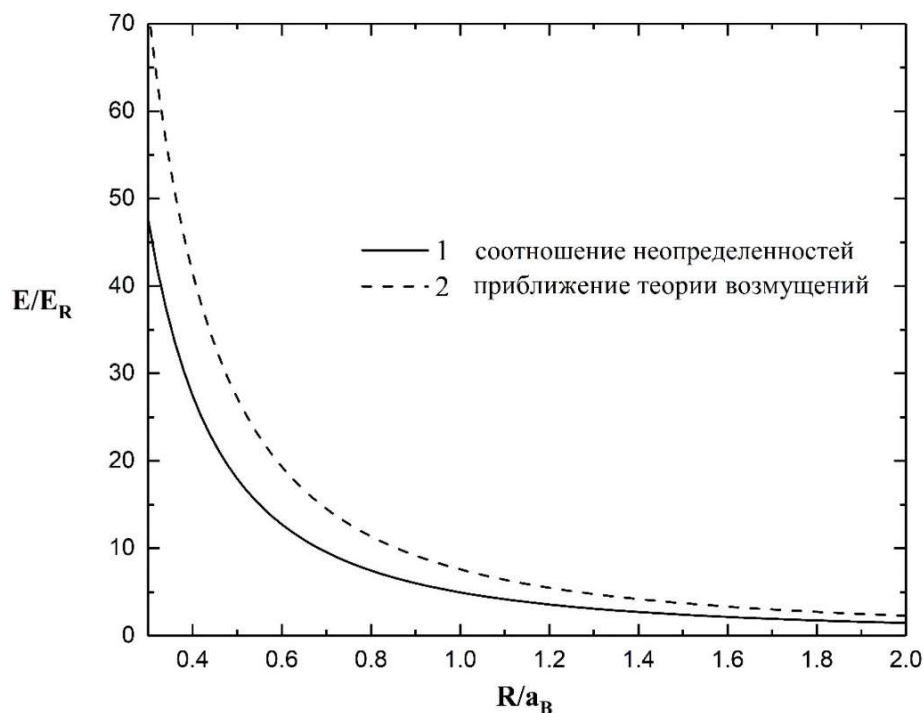


Рис. 1.2. Зависимость энергии двухэлектронной системы от радиуса КТ; 1 - энергия в первом приближении теории возмущений, 2 - оценка энергии на основе соотношения неопределенностей.

Как следует из представленных кривых, с увеличением радиуса КТ энергия системы уменьшается, так как с одной стороны ослабевает РК, а с другой - энергия кулоновского взаимодействия, однако характер зависимостей разный: $1/R$ для энергии кулоновского взаимодействия и $1/R^2$ для энергии РК.

Сравним полученное в данной работе значение энергии основного состояния E (мэВ) с результатами, полученными в работе [44]. Для сравнения результатов введена величина $\gamma' = \gamma / (\gamma + 1)$, $\gamma = \hbar\omega$.

γ'	Возм.	ХФ	Кон-Шам	Точн.	Числ.
0.1	0.64	0.56	0.59	0.54	0.54
0.2	1.22	1.11	1.16	1.08	1.09
0.3	1.9	1.77	1.84	1.73	1.74
0.4	2.78	2.62	2.7	2.57	2.58
0.5	3.94	3.76	3.87	3.72	3.73
0.6	5.65	5.44	5.57	5.39	5.4
0.7	8.48	8.19	8.35	8.13	8.14
0.8	13.88	13.56	13.79	13.5	13.5
0.9	29.82	29.37	29.71	29.29	29.31

Таблица 1.1. сравнение полученного значения энергии основного состояния со значениями энергии (Возм.), полученными другими методами: ХФ – метод Хартри-Фока, Кон-Шам – метод Кона-Шама, Точн. – метод точной диагонализации, Числ. – численное решение уравнения Шредингера.

Как можно видеть из данной таблицы, полученные в приближении теории возмущений результаты для величины энергии основного состояния достаточно хорошо согласуются с результатами других методов, таких как метод Хартри-Фока, метод Кона-Шама и т. д. Отклонение от более точных методов приходится на случай больших радиусов КТ. В случае малых радиусов (большие значения γ'), совпадение становится более точным, так как кулоновское взаимодействие становится менее значимым по сравнению с РК.

1.2.3. Обменный интеграл и время обмена состояниями

Построим волновую функцию рассматриваемой системы с учетом наличия спина у электронов. Общая волновая функция в этом случае имеет следующий вид:

$$\Psi = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, s_{1z}, s_{2z}). \quad (1.17)$$

Задачу будем решать в приближении Рассела-Саундерса, когда взаимодействие между частицами не зависит от спинов. Тогда волновую функцию можно записать в виде произведения координатной и спиновой частей [55]:

$$\Psi = \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \varphi(s_{1z}, s_{2z}), \quad (1.18)$$

в z - представлении по матрицам Паули:

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.19)$$

Учитывая два важных квантовомеханических принципа: принцип неразличимости тождественных частиц и принцип Паули, могут существовать две координатные волновые функции: симметричная и антисимметричная [55]:

$$\begin{aligned} \Phi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Phi^{(1)}(\vec{r}_1) \Phi^{(2)}(\vec{r}_2) + \Phi^{(1)}(\vec{r}_2) \Phi^{(2)}(\vec{r}_1) \} \\ \Phi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Phi^{(1)}(\vec{r}_1) \Phi^{(2)}(\vec{r}_2) - \Phi^{(1)}(\vec{r}_2) \Phi^{(2)}(\vec{r}_1) \} \end{aligned}, \quad (1.20)$$

$$\begin{aligned} \Phi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \Phi_S(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \\ \Phi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= -\Phi_A(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \end{aligned}. \quad (1.21)$$

Принцип Паули требует, чтобы полная волновая функция была антисимметрична, то есть имеются две возможности:

$$\begin{aligned} \Psi_{singlet} &= \Phi_S \chi_A \\ \Psi_{triplet} &= \Phi_A \chi_S \end{aligned}. \quad (1.22)$$

Для двухэлектронных спиновых волновых функций имеются известные соотношения [53]:

$$\chi_S = \begin{cases} \alpha(1)\alpha(2), \uparrow\uparrow \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \alpha(1)\beta(2) + \alpha(1)\beta(2) \}, \uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow, \\ \beta(1)\beta(2), \downarrow\downarrow \end{cases} \quad (1.23)$$

$$\chi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1) \}, \uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow, \quad (1.24)$$

где $\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Таким образом, имеются состояния с полным значением спина $S = s_1 + s_2$, $S = 0$ и $S = 1$. Следовательно, для определения энергии КТ в первом приближении теории возмущений достаточно вычислить среднее значение оператора Гамильтона (1.1) в этих состояниях [55]:

$$\begin{aligned} E_S &= \int \Phi_S^{(i)} \widehat{H} \Phi_S^{(k)} d\tau = E_i^{(0)} + E_k^{(0)} + Q + A \\ E_A &= \int \Phi_A^{(i)} \widehat{H} \Phi_A^{(k)} d\tau = E_i^{(0)} + E_k^{(0)} + Q - A \end{aligned} \quad (1.25)$$

где i и k - совокупность квантовых чисел каждого электрона,

$$Q = \int \Psi_1^*(\vec{r}_1) \Psi_1(\vec{r}_1) \frac{e^2}{r_{12}} \Psi_2(\vec{r}_2) \Psi_2^*(\vec{r}_2) d\tau, \quad (1.26)$$

$$A = \int \Psi_1^*(\vec{r}_1) \Psi_2^*(\vec{r}_2) \frac{e^2}{r_{12}} \Psi_1(\vec{r}_2) \Psi_2(\vec{r}_1) d\tau, \quad (1.27)$$

где Q - Кулоновский интеграл, A - обменный интеграл. Обменный интеграл своеобразен и не истолковывается классически. Он определяет часть кулоновского взаимодействия, связанную с корреляцией движения электронов, а именно благодаря ему электроны могут обмениваться состояниями [54]. Время обмена состояниями определяется интегралом A , согласно следующей формуле:

$$\tau = \frac{\pi \hbar}{2A}. \quad (1.28)$$

Это означает, что если в момент времени $t = 0$ электрон 1 находился в состоянии $|i\rangle$, электрон 2 находился в состоянии $|k\rangle$, то за промежуток времени τ они обмениваются состояниями. В состояниях χ_S полное значение спина равно единице, а в состояниях χ_A - нулю. Поэтому различают триплетные и синглетные состояния. В атоме гелия, например, состояния $S = 0$ и $S = 1$ называются парагелием и ортогелием, соответственно.

В основном состоянии спины имеют различные направления, то есть $S = 0$ и имеем синглетное состояние (парасостояние). Обменный интеграл в этом случае совпадает с кулоновским, поэтому:

$$A_{1s1s} = \frac{e^2 \sqrt{2}}{a_B \epsilon \pi^{1/2}} \frac{1}{R}. \quad (1.29)$$

И соответственно для времени обмена состояниями имеем (см. Рис. 1.3):

$$\tau_{1s1s} = \frac{\pi^{3/2} \epsilon \hbar a_B}{e^2 2\sqrt{2}} R. \quad (1.30)$$

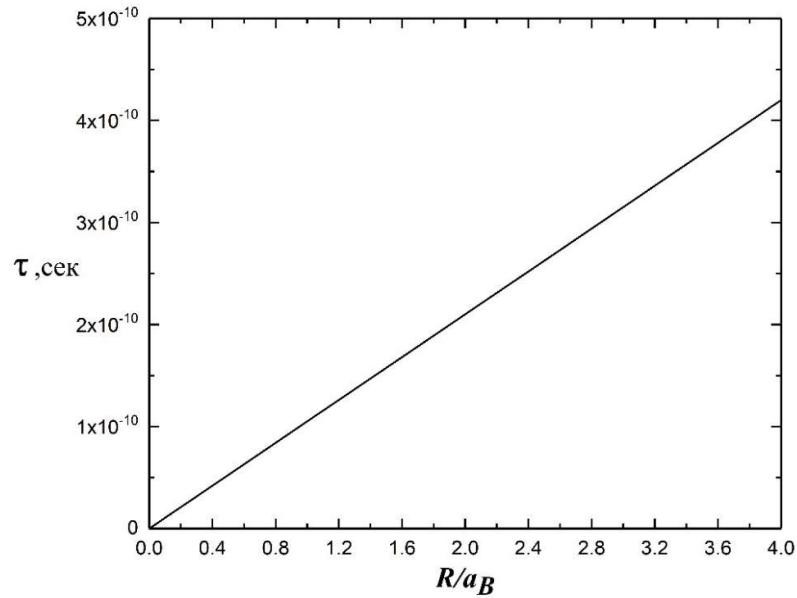


Рис. 1.3. Зависимость времени обмена состояниями от радиуса КТ.

Из Рис. 1.3 следует, что с ростом радиуса КТ время обмена состояниями растет, что является следствием ослабления перекрытия волновых функций электронов. При этом, зависимость $\tau(R)$ в рассматриваемом приближении линейная.

1.3 Дивалентные примесные состояния в параболической квантовой точке

Теперь обратимся к случаю, когда помимо двух электронов в центре КТ находится примесь (см. Рис.1.4).

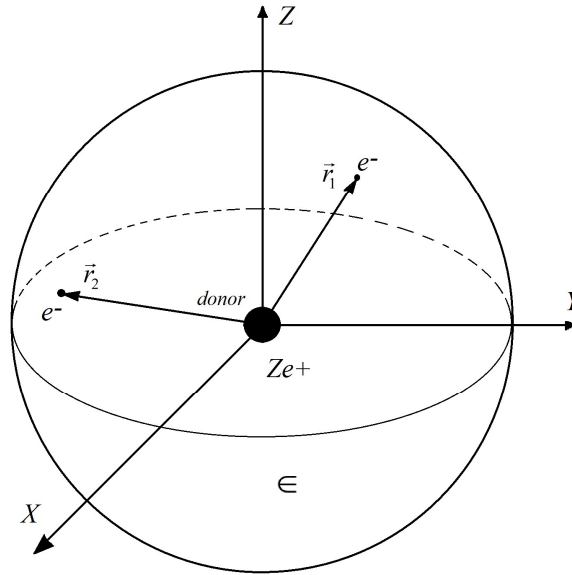


Рис. 1.4. Схематическое изображение дивалентной примеси в КТ.

Тогда гамильтониан системы при наличии примеси запишется как:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^2 \hat{H}_i + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (1.31)$$

где теперь $\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + \frac{\mu\omega^2 r^2}{2} - \frac{Ze^2}{\epsilon r}$ - гамильтониан одноэлектронной примеси в параболической КТ, а Ze - заряд примеси.

1.3.1 Оценка энергии основного состояния с помощью метода соотношения неопределенностей

В случае наличия примеси классическое выражение энергии будет иметь следующий вид:

$$E(r_1, r_2) = \frac{p_1^2}{2\mu} + \frac{p_2^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega^2 r_1^2}{2} + \frac{\mu\omega^2 r_2^2}{2} - \frac{Ze^2}{\epsilon r_1} - \frac{Ze^2}{\epsilon r_2} + \frac{e^2}{\epsilon |\vec{r}_2 - \vec{r}_1|}. \quad (1.32)$$

Проведя выкладки, аналогичные сделанным в предыдущем параграфе, для r_{\min} придём к следующему уравнению четвертой степени:

$$\frac{r_{\min}^4}{R^4} + \left(Z - \frac{1}{4} \right) r_{\min} - 1 = 0. \quad (1.33)$$

На основе этого результата определяется зависимость энергии основного состояния от радиуса КТ. Окончательно для нее получим:

$$E_{\min} = \frac{\hbar^2}{\mu a_B^2} \left(\frac{1}{r^2} + \frac{r^2}{R^4} \right) - \frac{e^2}{a_B} \left(Z - \frac{1}{4} \right) \frac{1}{r}. \quad (1.34)$$

Данная зависимость приведена на Рис. 1.6.

1.3.2 Одноэлектронная проблема в рамках вариационного метода

Так как задача с гамильтонианом \hat{H}_i при наличии примеси не является точно решаемой, воспользуемся методом вариации. В безразмерных величинах радиальную часть гамильтониана системы можно записать в виде [49]:

$$\hat{H} = -\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \beta^2 r^2 - \frac{2Z}{r}, \quad (1.35)$$

где $\beta = \frac{\hbar\omega}{2R_y}$ - параметр параболического потенциала ограничения. Пробная волновая

функция берется в следующем виде:

$$\psi_{ir}(r, \lambda) = C(\lambda) \exp\left(-\frac{\beta r^2}{\lambda}\right) \exp(-\lambda r), \quad (1.36)$$

где λ - вариационный параметр, а $C(\lambda)$ - постоянная нормировки. Вариационный параметр, а, следовательно, одноэлектронная энергия, и волновая функция основного состояния, как функции параболического потенциала ограничения β , могут быть получены из следующего условия минимизации:

$$I(\lambda, \beta) = \frac{\langle \Psi^* | \hat{H}_{rad} | \Psi \rangle}{\langle \Psi^* | \Psi \rangle} \rightarrow \min. \quad (1.37)$$

Подставляя пробную волновую функцию и проводя интегрирование получим:

$$I(\lambda, \beta) = \frac{-2\sqrt{\beta}(2Z\beta + 3\beta\lambda + \lambda^3) + e^{\frac{\lambda^2}{\beta}} \sqrt{\pi} (3\beta^2 + 2\lambda^4 + \beta\lambda(4Z + 7\lambda)) \operatorname{Erfc}\left(\frac{\lambda}{\sqrt{\beta}}\right)}{-2\sqrt{\beta}\lambda + e^{\frac{\lambda^2}{\beta}} \sqrt{\pi} (\beta + 2\lambda^2) \operatorname{Erfc}\left(\frac{\lambda}{\sqrt{\beta}}\right)}, \quad (1.38)$$

где $Erfc$ - дополнительная функция ошибок. Из условия минимизации получаем приближённую формулу зависимости (для случая $Z = 2$) вариационного параметра λ_{\min} от параметра β :

$$\lambda_{\min}(\beta) = \alpha_1 + \frac{\alpha_2}{\alpha_3 + \beta}, \quad (1.39)$$

Где $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ были найдены численно: $\alpha_1 \approx 1.17, \alpha_2 \approx 0.89, \alpha_3 \approx 1.09$.

Кроме того, из условия минимизации получаем зависимость энергии основного состояния одноэлектронной задачи от частоты ограничения. В результате находим зависимость энергии от радиуса КТ.

Заметим также, что при $Z = 1$, переходя к пределу $\beta \rightarrow 0$ (параболический потенциал исчезает), приходим в точности к волновой функции основного состояния атома водорода:

$$I(\lambda, 0) = (-2 + \lambda)\lambda, \quad (1.40)$$

$$\frac{dI(\lambda, 0)}{d\lambda} = -2 + 2\lambda. \quad (1.41)$$

Из условия $\frac{dI(\lambda, 0)}{d\lambda} = 0$ получаем, что $\lambda = 1$ в точности соответствует волновой функции атома водорода в основном состоянии. Полученные выше зависимости используются в следующем параграфе для расчёта полной энергии системы (см Рис 1.6).

1.3.3 Расчет поправки энергии электронного взаимодействия в основном состоянии

Вычислим энергию электрон - электронного взаимодействия в рамках стационарной теории возмущений. В данном случае она записывается в виде:

$$\begin{aligned} \Delta V &= \int \Phi_{1s}^2(r_1) \Phi_{1s}^2(r_2) \widehat{V} r_1^2 r_2^2 d\Omega_1 d\Omega_2 dr_1 dr_2 = \\ &= \frac{e^2}{2\epsilon a_B} \int_0^\infty \int_0^\infty \psi^2(r_1) \psi^2(r_2) r_1^2 r_2^2 \int_0^\pi \frac{\sin\theta_1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta_1}} d\theta_1, \end{aligned} \quad (1.42)$$

где $d\Omega$ - элемент телесного угла. Используя выражение (см. дополнение)

$$\int_0^\pi \frac{\sin\theta_1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta_1}} d\theta_1 = \begin{cases} \frac{2}{r_2}, & r_2 > r_1 \\ \frac{2}{r_1}, & r_2 < r_1 \end{cases}, \quad (1.43)$$

получаем:

$$\begin{aligned} \Delta V &= \frac{e^2}{\epsilon a_B} \int_0^\infty \int_0^{r_1} \psi^2(\lambda(\beta), \beta, r_1) \psi^2(\lambda(\beta), \beta, r_2) r_1 r_2^2 dr_2 dr_1 + \\ &+ \frac{e^2}{\epsilon a_B} \int_0^\infty \int_{r_1}^\infty \psi^2(\lambda(\beta), \beta, r_1) \psi^2(\lambda(\beta), \beta, r_2) r_1^2 r_2 dr_2 dr_1. \end{aligned} \quad (1.44)$$

Вычисляя интеграл (1.44) численно, определим зависимость ΔV от радиуса КТ (Рис. 1.5). Как можно видеть из рисунка, значение энергии электрон - электронного взаимодействия уменьшается с увеличением радиуса КТ по закону, близкому к $1/R$.

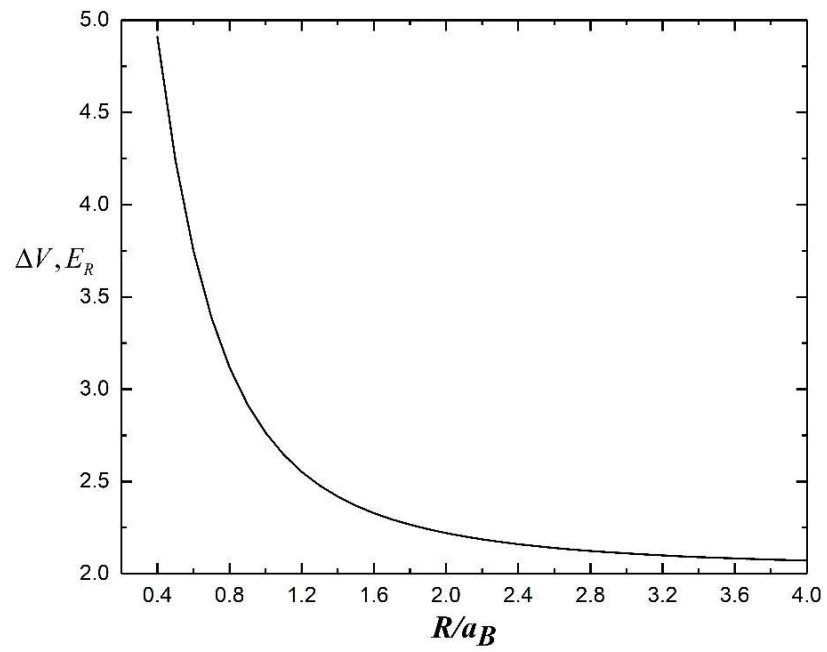


Рис. 1.5. Зависимость энергии электрон - электронного взаимодействия от радиуса КТ.

Используя эти результаты, можем вычислить энергию основного состояния системы в рамках теории возмущений:

$$E = 2E_0 + \Delta V, \quad (1.45)$$

где E_0 - энергия одноэлектронной системы.

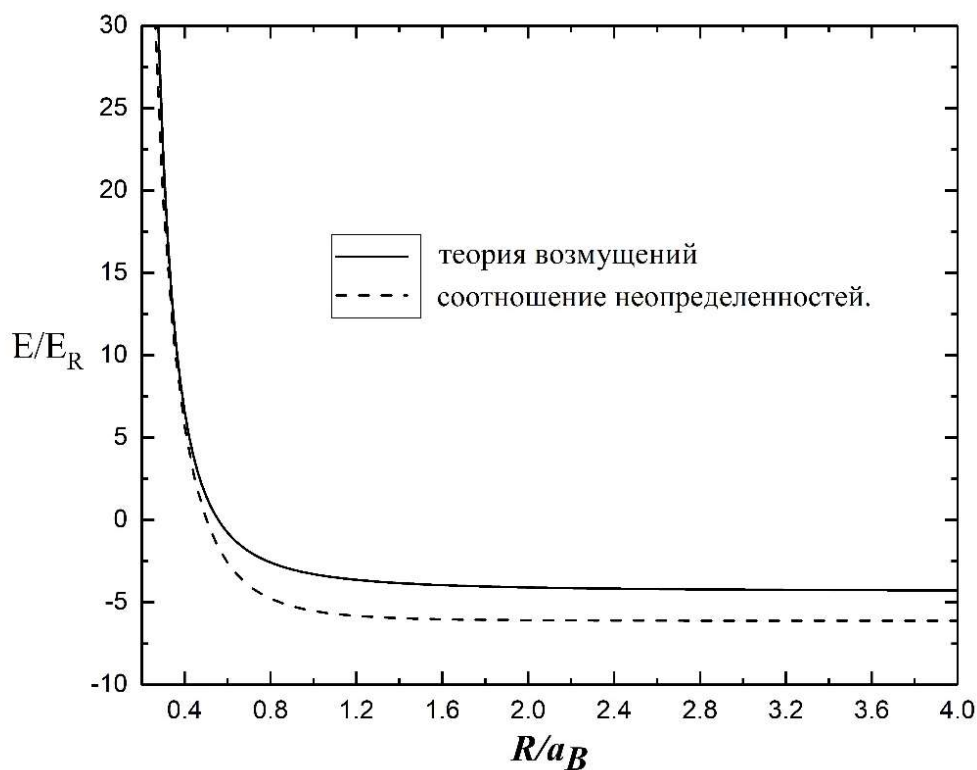


Рис. 1.6. Зависимость энергии основного состояния системы от радиуса КТ в рамках теории возмущений (сплошная линия), и на основании соотношения неопределенностей (пунктирная линия).

Как рисунка 1.6 следует, что энергия двухэлектронной системы монотонно уменьшается с увеличением радиуса КТ, переходя из области положительных значений в область отрицательных через ноль. Поведение кривой зависимости энергии основного состояния, определенной на основе соотношения неопределённости Гейзенберга, качественно совпадает с аналогичной кривой зависимости, определенной в рамках теории возмущений. При этом, результаты хорошо согласуются в области малых радиусов. С уменьшением радиуса КТ положительная энергия РК становится больше, чем отрицательная кулоновская энергия притяжения примеси. Из-за этого полная энергия системы становится положительной. С увеличением радиуса КТ энергия РК уменьшается, и полная энергия системы монотонно стремится к энергии дивалентной донорной примеси в массивном полупроводнике.

Зависимость времени обмена состояниями от радиуса КТ в присутствии примеси представлена на Рис.1.7.

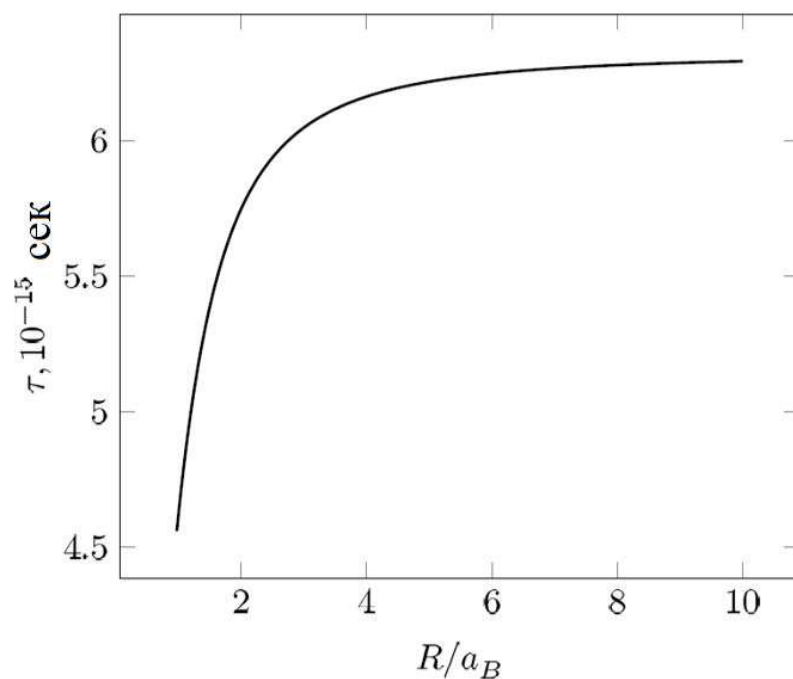


Рис. 1.7. Зависимость времени обмена состояниями между электронами от радиуса КТ в присутствии примеси.

Из него следует, что с увеличением радиуса КТ время обмена состояниями будет увеличиваться, так как будет уменьшаться обменный интеграл. При этом влияние параболического потенциала ограничения будет уменьшаться и, поэтому, кулоновское взаимодействие между электронами будет играть все более важную роль. С увеличением радиуса КТ электроны "чувствуют" друг друга слабее и обмен состояниями становится менее вероятным. Как мы можем видеть из рисунков 1.3 и 1.7, имеет место принципиальное отличие в поведении кривых времени обмена состояниями, в зависимости от того, присутствует примесь в центре КТ или нет. При отсутствии примеси время обмена состояниями линейным образом монотонно возрастает с ростом радиуса КТ. Если же в центре КТ расположена водородоподобная примесь, то локализация электронов при достаточно больших радиусах КТ осуществляется за счёт кулоновского поля примеси (Рис. 1.7), и как следствие система становится аналогичной дивалентной примеси в массивном полупроводнике. Ясно, что начиная с некоторого значения R время обмена состояниями практически не зависит от радиуса КТ и кривая $\tau(R)$ имеет насыщающее поведение, стремясь к значению

$\tau \sim 6 \cdot 10^{-15}$ сек. Наконец отметим, что это время в случае реального атома гелия имеет порядок 10^{-16} сек.

ГЛАВА II: ОПТИЧЕСКИЕ И ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КВАНТОВЫХ ШТРИХОВ

2.1 Введение

Сравнительно недавно были получены КТ, имеющие форму сильно вытянутой усеченной призмы, так называемые КШ [56-60]. В таких структурах возможен определенный контроль над одночастичными процессами, такими как электрон-дырочная рекомбинация или процессы релаксации носителей заряда в КШ, что оказывает большое влияние на динамику носителей заряда и высокоскоростные свойства устройств. Возможность гибкой манипуляции энергетическими уровнями носителей заряда позволяет управлять характерной длиной волны излучения в режиме от 1,3 до 2 мкм. Поэтому, а также по причине того, что КШ имеют высокие ожидаемые значения коэффициента квантового выхода, последние представляют особый интерес для телекоммуникационных приложений, таких как лазеры и детекторы дальнего инфракрасного диапазона [56-58].

Авторами [15] были обнаружены изменения геометрии наностроек InSb от геометрии КТ к КШ в зависимости от условий роста. Авторы сообщили о реализации КШ из InSb путем металлоорганической парафазной эпитаксии. Были обнаружены узкие линии в спектре излучения, связанные с образованием электрон-дырочной пары в единичном КШ. При этом проблема описания движения НЗ в таких структурах рассматривалась в работах [15,60], где авторы исследовали оптические свойства КШ и показали удачное совпадение теоретических расчетов с результатами эксперимента. При этом КШ аппроксимировался сильно сплюснутой усеченной призмой, а также не учитывались эффекты механического напряжения. С другой стороны, недавние эксперименты по выращиванию КШ, представленные в [15], показали возможность реализации вертикально расположенных КШ малой ширины, когда геометрические размеры одной из сторон намного меньше двух других.

Геометрия структур, представленных авторами [15], в первом приближении может быть аппроксимирована прямоугольным параллелепипедом малой толщины. Это позволяет вводить сравнительно простую математическую модель, описывающую подобные системы. При этом, которая в случае непроницаемых стенок данная модель

является аналитически точно решаемой. Примечательно, что одночастичные состояния и спектр межзонного поглощения в такой структуре обладают рядом интересных свойств, связанных с характером вырождения одноэлектронных энергетических уровней.

Отметим, что существует связь между геометрией квантового параллелепипеда и пифагоровыми тройками. Как следствие, появляется теоретическая возможность «визуализации» пифагоровых троек в спектре поглощения ансамбля КШ в форме параллелепипеда.

Наряду с оптическими свойствами КШ, вызывает интерес изучение их электростатических характеристик. В частности, речь идет об электростатических полях, создаваемых электронами, локализованными в КШ. Одним из наиболее интенсивно исследуемых устройств в современной наноэлектронике является одноэлектронный транзистор, основанный на эффекте кулоновской блокады в КТ [61]. Электрон или несколько электронов, локализованных в КТ, создают отталкивающее кулоновское поле, которое не позволяет внешнему электрону проникнуть внутрь КТ. По этой причине важной является задача определения этого поля, при этом необходимо учитывать пространственное распределение электрона внутри КШ. Это обстоятельство приводит к необходимости учета электростатических мультиполей. Важно отметить, что многие физические характеристики наносистем, такие как взаимодействие между КТ и так далее, определяются дипольным и квадрупольным моментами носителей заряда [62].

Наконец вызывает интерес рассмотрение КШ, имеющего форму усеченной призмы.

Понятно, что такая геометрия КШ является более реалистичной и ее изучение является актуальной задачей. К сожалению, даже одночастичное уравнение Шредингера в случае усеченной призмы не позволяет реализовать разделение переменных. Как следствие, становится необходимым применение приближенных методов. В данном случае очень эффективным может оказаться адиабатическое описание. Последний параграф данной главы посвящен изучению оптических свойств КШ, имеющего форму усеченной призмы в рамках адиабатического метода. При этом помимо одноэлектронных эффектов обсуждаются также экситонные.

2.2 Оптическая визуализация пифагоровых троек в квантовом штрихе в форме параллелепипеда

2.2.1. Электронные состояния

Рассмотрим КШ из *InSb*, имеющий форму прямоугольного параллелепипеда, одна сторона которого значительно меньше двух других $L_z \ll \{L_x, L_y\}$ (Рис. 2.1).

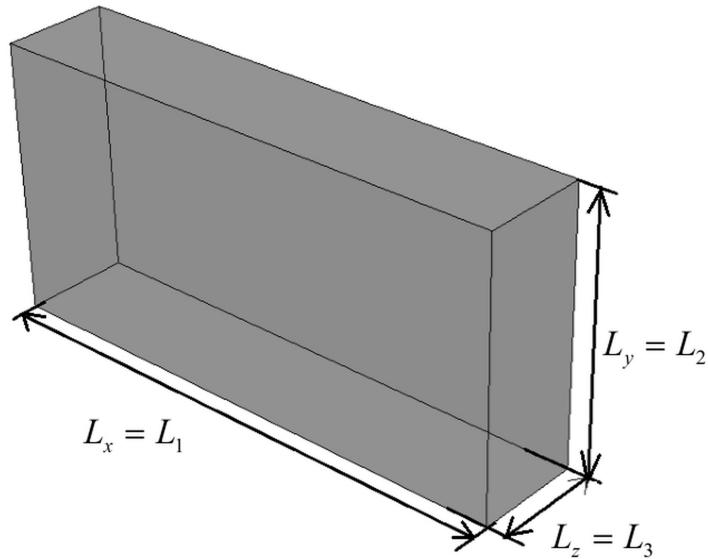


Рис. 2.1. Схематическое изображение квантового штриха в форме параллелепипеда.

В этом случае энергия РК в направлении oZ будет значительно превышать аналогичные энергии в направлениях oX и oY . Обозначив эффективную массу электрона в направлении oZ через μ_z^e , а в плоскости XoY через μ_e запишем уравнение Шредингера в декартовых координатах:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu_z^e} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U_{Conf}^{(3)}(x, y, z) \right\} \Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z). \quad (2.1)$$

Предположим, что КШ является непроницаемым, тогда потенциал ограничения может быть записан как:

$$U_{Conf}^{(3)}(x, y, z) = \begin{cases} 0, \{x, y, z\} \in \Omega^{(3)} \\ \infty, \{x, y, z\} \notin \Omega^{(3)} \end{cases}, \quad \Omega^{(3)} = \begin{cases} 0 \leq x \leq L_1 \\ 0 \leq y \leq L_2 \\ 0 \leq z \leq L_3 \end{cases}. \quad (2.2)$$

Предполагая, что частица в направлении oZ находится в основном состоянии ($n_z = 1$), придем к двумерному уравнению Шредингера со следующими спектром энергии и волновой функцией [53]:

$$E_{n_1, n_2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu_e} \sum_{j=1}^2 \left(\frac{n_j}{L_j} \right)^2, \quad (2.3)$$

$$\Psi_{n_1, n_2}(x, y) = \prod_{j=1}^2 \sqrt{\frac{2}{L_j}} \sin \frac{\pi n_j}{L_j} x_j. \quad (2.4)$$

Заметим, что в общем случае $L_1 \neq L_2$ уровни энергии являются невырожденными, т.е. $E_{n_1, n_2} \neq E_{n_2, n_1}$. Однако ситуация меняется, когда рассматривается задача с прямоугольным сечением ($L_1 = L_2 \equiv L$). Тогда для энергетического спектра частицы имеем следующее выражение:

$$E_{n_1, n_2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu_e L^2} \{n_1^2 + n_2^2\}. \quad (2.5)$$

Из выражения (2.5) сразу же следует, что

$$E_{n_1, n_2} = E_{n_2, n_1}. \quad (2.6)$$

На первый взгляд здесь налицо двукратное вырождение уровней, когда одной и той же энергии соответствуют два разных состояния $\Psi_{n_1, n_2}(x, y)$ и $\Psi_{n_2, n_1}(x, y)$. Однако ситуация не столь проста, какой кажется на первый взгляд. Рассмотрев состояния $\Psi_{1,7}(x, y)$, $\Psi_{7,1}(x, y)$ и $\Psi_{5,5}(x, y)$, легко убедиться, что всем трем состояниям соответствует энергия:

$$E_{7,1} = E_{1,7} = E_{5,5} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu_e L^2} 50. \quad (2.7)$$

Если сделать обозначения $n_1 = 7$, $n_2 = 1$, $n_3 = 5$, легко заметить, что:

$$n_1^2 + n_2^2 = 2n_3^2, \{n_1, n_2, n_3\} \in N. \quad (2.8)$$

Иначе говоря, набору натуральных чисел n_1 , n_2 и n_3 , удовлетворяющих (2.8), будет соответствовать трехкратно вырожденный уровень:

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu_e L^2} \{n_1^2 + n_2^2\} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu_e L^2} \{n_3^2 + n_3^2\}. \quad (2.9)$$

Пусть $n_1 > n_2$. Сделаем следующие преобразования:

$$2n_3^2 = \frac{1}{2} [2n_1^2 + 2n_2^2] = 2 \left[\left(\frac{n_1 - n_2}{2} \right)^2 + \left(\frac{n_1 + n_2}{2} \right)^2 \right], \quad (2.10)$$

откуда следует:

$$n_3^2 = \left(\frac{n_1 - n_2}{2} \right)^2 + \left(\frac{n_1 + n_2}{2} \right)^2. \quad (2.11)$$

Если введем следующие обозначения:

$$\frac{n_1 - n_2}{2} = a, \quad (2.12)$$

$$\frac{n_1 + n_2}{2} = b, \quad (2.13)$$

то (2.8) примет вид:

$$a^2 + b^2 = n_3^2, \quad (2.14)$$

где a и b - натуральные числа. Решениями этого уравнения в натуральных числах являются пифагоровы тройки [63]. Для того, чтобы построить семейства трехкратно вырожденных состояний, будем брать за основу примитивные пифагоровы тройки (тройки, наибольший общий делитель которых равен единице), которые выделим дефисами сверху $(\bar{a}, \bar{b}, \bar{n}_3)$. Ясно, что при прямом умножении всех чисел на одно и то же число, снова получается пифагорова тройка. Выпишем три примитивные пифагоровы тройки с соответствующими им пифагоровыми тройками, кратными 2 и 3 в таблицу $(\bar{a}, \bar{b}, \bar{n}_3)$ умножены на 2 и 3).

(3,4,5)	(5,12,13)	(8,15,17)
(6,8,10)	(10,24,26)	(16,30,34)
(9,12,15)	(15,36,39)	(24,45,51)

Таблица 2.1. Пифагоровы тройки.

Для Пифагоровой тройки a, b, n_3 энергия электрона:

$$E_{n_1, n_2} = E_{n_2, n_1} = E_{n_3, n_3} \rightarrow \begin{cases} \Psi_{b+a, b-a}(x, y) \\ \Psi_{n_3, n_3}(x, y) \\ \Psi_{b-a, b+a}(x, y) \end{cases} . \quad (2.15)$$

Подводя итог, можно сказать, что для каждой примитивной тройки Пифагора $\bar{a}, \bar{b}, \bar{n}_3$ существуют бесконечные множества трехкратно вырожденных уровней, получаемых умножением тройки на одно и то же число. Это может быть изображено геометрически с использованием сетки натуральных чисел (см. Рис.2.3).

Обычно рассматриваются только примитивные пифагоровы тройки, так как все остальные тройки могут быть получены по рассмотренной схеме из примитивных. Примитивные пифагоровы тройки, как было доказано, образуют бесконечное дерево (см. Рис. 2.2), где переход от одной пифагоровой тройки к другой может быть осуществлен путем умножения на конечное произведение матриц U , A и D [64].

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ -2 & -1 & -2 \\ 2 & 2 & 3 \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & 3 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} -1 & -2 & -2 \\ -2 & -1 & -2 \\ 2 & 2 & 3 \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Существует бесконечное семейство трехкратно вырожденных энергетических уровней, которое выражается пифагоровыми тройками. Кроме того, для каждой примитивной пифагоровой тройки существует семейство трехкратно вырожденных состояний:

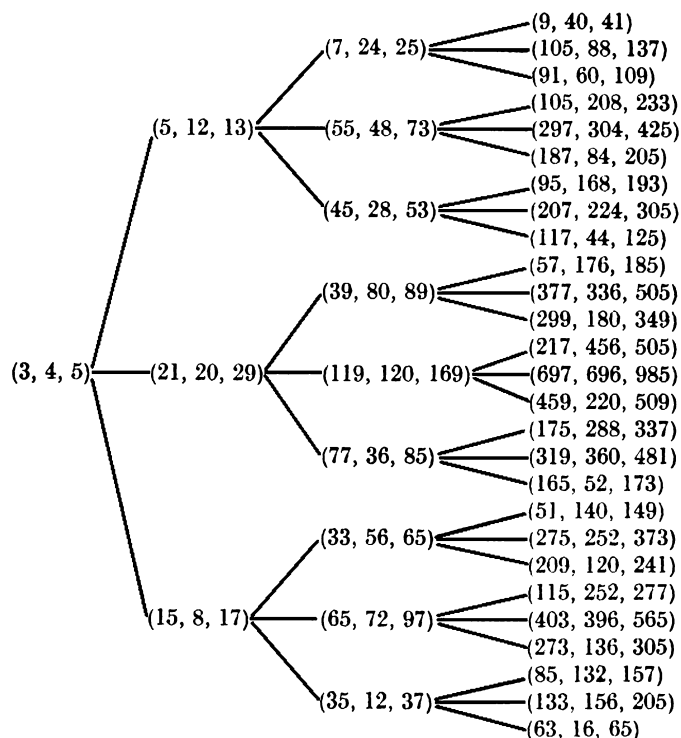


Рис. 2.2. Дерево примитивных троек Пифагора.

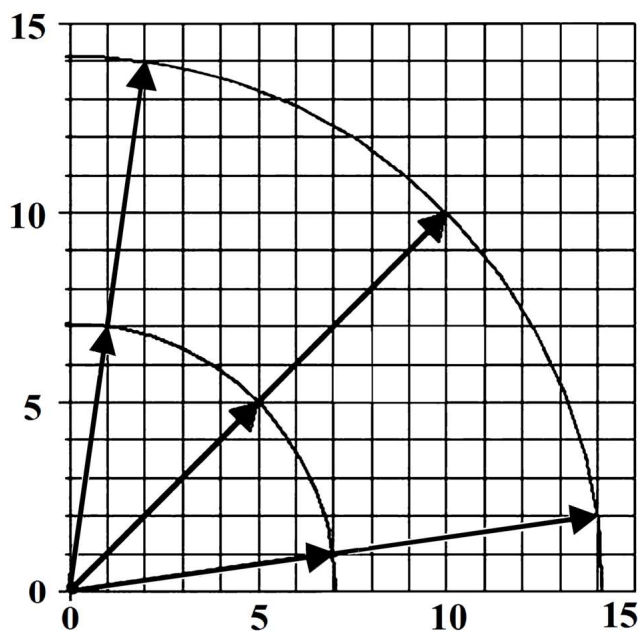


Рис. 2.3. Сетка натуральных чисел, где на осях отложены квантовые числа

$$\bar{R}(3,4,5) = \sqrt{2} \cdot 5, \bar{R}(6,8,10) = \sqrt{2} \cdot 10.$$

Примечательно, что переход от одной пифагоровой тройки к другой реализует модулярная группа $\Gamma(2)$ [65], которая также является группой преобразования спиноров. При этом, можно составить матрицу вида:

$$X = \begin{pmatrix} n_3 + b & a \\ a & n_3 - b \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

условие равенства нулю детерминанта этой матрицы и есть условие выполнения равенства Пифагора:

$$\det X = n_3^2 - a^2 - b^2 = 0. \quad (2.18)$$

Наконец, отметим, что возможна ситуация, когда имеем четыре различных натуральных числа n_1, n_2, n_3, n_4 , для которых имеет место равенство $n_1^2 + n_2^2 = n_3^2 + n_4^2$. Например, рассмотрим следующие числа: $n_1 = 15, n_2 = 20, n_3 = 7, n_4 = 24$. Можно сгенерировать эти четыре различных положительных натуральных числа, заменив наибольшее число пифагоровой тройки на сумму наименьшего и среднего числа другой пифагоровой тройки с тем же самым большим числом. Это означает, что существуют семейства четырех и более кратно вырожденных энергетических уровней.

2.2.2. Оптическое межзонное поглощение

Полученные результаты позволяют вычислить коэффициент межзонного поглощения в указанной системе. В дипольном приближении, когда пренебрегаются экситонные эффекты, коэффициент будет иметь вид [66]:

$$K(\omega) = K_0 \sum_{\nu_e, \nu_h} \left| \int \Psi_{\nu_e} \Psi_{\nu_h} dV \right|^2 \delta(\hbar\omega - E_g - E_{\nu_e}^e - E_{\nu_h}^h), \quad (2.19)$$

где E_g - ширина запрещенной зоны полупроводника, ω - частота падающего света, $E_{\nu_e}^e$ ($E_{\nu_h}^h$) - энергия электрона(дырки), $\nu_e = \{n_x^e, n_y^e, n_z^e\}$ и $\nu_h = \{n_x^h, n_y^h, n_z^h\}$ - наборы квантовых чисел электрона и дырки соответственно. K_0 - величина, пропорциональная квадрату модуля матричного элемента дипольного момента, взятого по функциям Блоха, а δ - функция обеспечивает закон сохранения энергии при переходах. Подставляя соответствующие волновые функции и вычисляя интегралы, приходим к следующим правилам отбора:

$$\left. \begin{aligned} n_z^e &= n_z^h = 1 \\ n_x^e &= n_x^h \\ n_y^e &= n_y^h \end{aligned} \right\}. \quad (2.20)$$

Таким образом, из аргумента δ -функции в уравнении (2.19), для пороговых частот поглощения можно записать:

$$\hbar\omega_{n_x, n_y, n_z=1} = E_g + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2} \left(\frac{1}{\mu_z^e L_z^2} + \frac{n_x^2}{\mu_e L_x^2} + \frac{n_y^2}{\mu_e L_y^2} \right) + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2} \left(\frac{1}{\mu_z^h L_z^2} + \frac{n_x^2}{\mu_h L_x^2} + \frac{n_y^2}{\mu_h L_y^2} \right). \quad (2.21)$$

Ясно, что для квадратного сечения трехкратно вырожденные уровни будут проявляться ярче, чем двукратно вырожденные. Иначе говоря, как только будут рассматриваться состояния, сопряженные с пифагоровыми тройками $(\bar{a}, \bar{b}, \bar{n}_3)$, возникнут переходы:

$$|n_1^h, n_2^h, n_z^h = 1\rangle \rightarrow |n_1^e, n_2^e, n_z^e = 1\rangle. \quad (2.22)$$

$$|n_2^h, n_1^h, n_z^h = 1\rangle \rightarrow |n_2^e, n_1^e, n_z^e = 1\rangle. \quad (2.23)$$

$$|n_3^h, n_3^h, n_z^h = 1\rangle \rightarrow |n_3^e, n_3^e, n_z^e = 1\rangle. \quad (2.24)$$

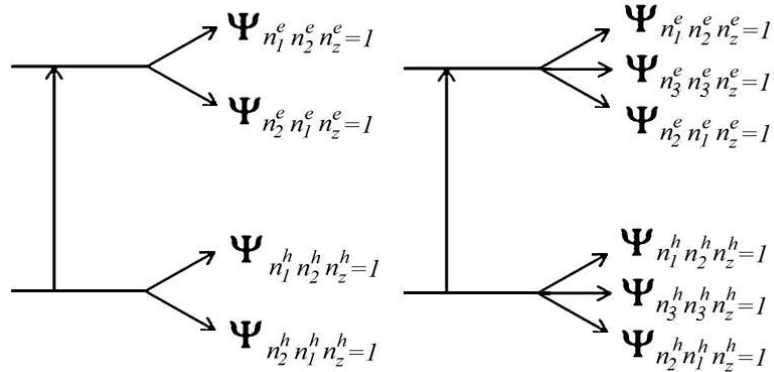


Рис. 2.4. Схематическое изображение дважды и трижды вырожденных уровней энергии.

Для коэффициента поглощения в режиме сильного РК, при учете указанных переходов получим:

$$K(\omega, L_1, L_2, L_3) = 2K_0 \sum_{v_e, v_h} \delta(\hbar\omega - E_g - E_{v_e}^e - E_{v_h}^h) + 3K_0 \sum_{\substack{\text{Pythagorean} \\ \text{triples}}} \delta(\hbar\omega - E_g - E_{v_e}^e - E_{v_h}^h) \quad (2.25)$$

Как известно, процесс формирования квантовых наноструктур связан с процессом реконденсации. Во время процесса выращивания ансамбля КТ, в зависимости от технологических параметров роста может возникнуть определенное распределение геометрических параметров КТ около их средних значений. Распределение геометрических параметров КТ вокруг своих средних значений, в случае роста методом металлоорганической парофазной эпитаксии, характеризуется асимметричным распределением [67,68]. В наших последующих расчетах будет использована функция распределения Лифшица - Слезова [69, 70]:

$$P_{LS}(u) = \begin{cases} \frac{3^4 eu^2 \exp(-(1-2u/3))}{2^{5/3} (u+3)^{7/3} (3/2-u)^{11/3}}, \\ 0, u > 3/2 \end{cases} \quad (2.26)$$

где u - отношение стороны КШ $u = L/\bar{L}$ к среднему значению стороны \bar{L} . Здесь рассматривается ансамбль КШ с квадратным поперечным сечением со стороной поперечного сечения L и фиксированной стороной L_3 .

Исходя из ортогональности электронной и дырочной волновых функций в режиме сильного РК, и с учетом правил отбора и дисперсии ансамбля КШ для коэффициента поглощения можно записать:

$$K = K_0 \sum_{n_x, n_y} \int_0^{3/2} P(u) \delta(\hbar\Omega - E_g - E_{n_x, n_y}^e - E_{n_x, n_y}^h) du, \quad (2.27)$$

где суммирование ведется по всем уровням, включая двукратно и трехкратно вырожденные. После введения следующих обозначений: $\gamma_v^2 = \theta/\beta_{n_x, n_y}$, где

$$\theta = \frac{\hbar\Omega - E_g}{E_g} + \frac{\alpha}{L_z^2}, \quad \beta_{n_x, n_y} = \frac{\alpha(n_x^2 + n_y^2)}{\bar{L}^2}, \quad \alpha = \left(1 + \frac{\mu_e}{\mu_n}\right) \frac{1}{E_g},$$

для коэффициента поглощения

получим:

$$K/K_0 = \frac{1}{2E_g} \sum_{n_x, n_y} \frac{1}{\beta_{n_x, n_y}} \gamma_{n_x, n_y}^3 P\left(\frac{1}{\gamma_{n_x, n_y}}\right). \quad (2.28)$$

Зависимость коэффициента поглощения от энергии падающего фотона для ансамбля КШ из *InSb* показана на Рис. 2.5.

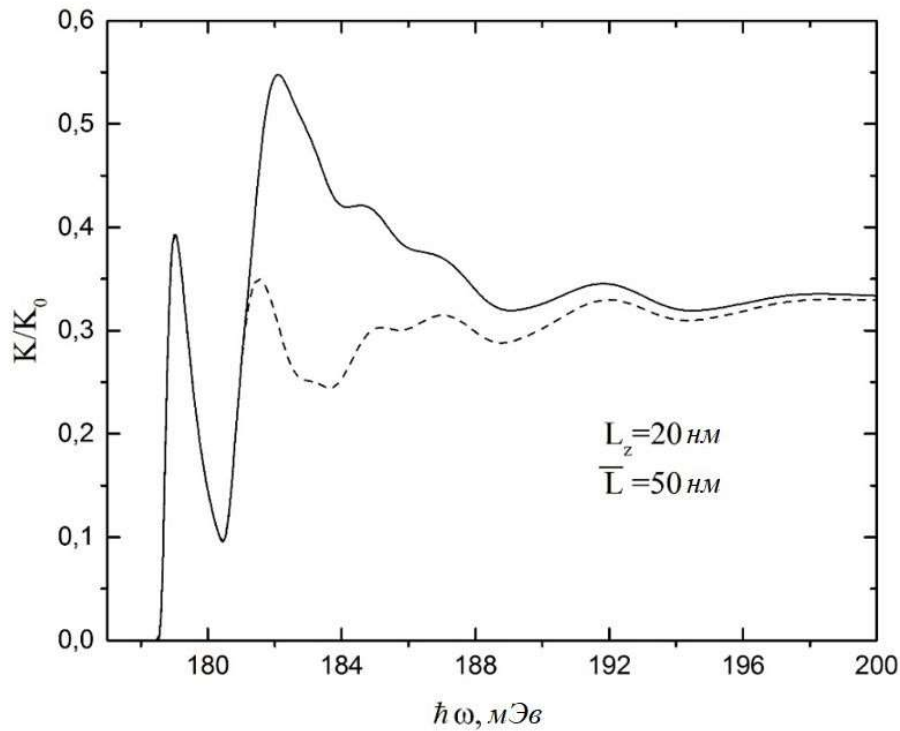


Рис. 2.5. Зависимость коэффициента поглощения от энергии падающего фотона с учетом (сплошная линия) и без учета переходов, связанных с трижды вырожденными энергетическими уровнями (пунктирная линия)

$$|1, 7, n_z^h = 1\rangle \rightarrow |1, 7, n_z^e = 1\rangle, |7, 1, n_z^h = 1\rangle \rightarrow |7, 1, n_z^e = 1\rangle, |5, 5, n_z^h = 1\rangle \rightarrow |5, 5, n_z^e = 1\rangle.$$

Отметим что в первом случае все переходы с квантовыми числами не выше семи (сплошная линия). Во втором случае (пунктирная линия) были учтены переходы, за исключением трехкратно вырожденных. Как видно из рисунка, учет переходов, связанных с трижды вырожденными уровнями, ведет к сравнительно более интенсивному проявлению соответствующего пика. Это связано с тем, что трижды вырожденные уровни позволяют осуществить три сценария межзонных переходов, вместо двух в случае двукратно вырождения. Таким образом, возникает Теоретическая возможность «визуализировать» пифагоровские тройки в ансамбле КШ.

2.3 Определение мультипольных поправок к полю, создаваемому электроном, локализованным в квантовом параллелепипеде

Вычислим зависимости электростатического дипольного и квадрупольного моментов от геометрических параметров КШ. Дипольный момент электрона может быть определен как [71]:

$$\vec{d} = \int \Psi^* e \vec{r} \Psi dV. \quad (2.29)$$

Подставляя соответствующее выражение для волновой функции и интегрируя по всему объему, можно показать, что значения дипольного момента в выражении (2.29) равны:

$$\vec{d} / e = (L_x/2, L_y/2, L_z/2). \quad (2.30)$$

Тензор квадрупольного момента электрона определяется как [71]:

$$Q_{ik} = \int \Psi^* \{3ij - \delta_{ij} \vec{r}^2\} \Psi dV, \quad i, j = x, y, z. \quad (2.31)$$

Теперь перейдем к вычислению электростатического потенциала $\varphi(r)$. В приближении двух первых членов мультипольного разложения для потенциала имеем [72]:

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{q}{\varepsilon r} + \frac{1}{r^2} \sum_i d_i r_{ui} + \frac{1}{2r^3} \sum_{i,j} Q_{i,j} r_{ui} r_{uj}, \quad (2.32)$$

где $\vec{r}_u = \vec{r}/r$. После вычисления интегралов (2.29) и (2.31) для $\varphi(x, 0, 0)$ в частности получаем:

$$\varphi(x, 0, 0) = \frac{e}{\varepsilon x} + \frac{eL_x}{2\varepsilon x^2} + \frac{e}{12\varepsilon x^3} \left(L_x^2 \left(4 - \frac{6}{n_x^2 \pi^2} \right) + L_y^2 \left(\frac{3}{n_y^2 \pi^2} - 2 \right) + L_z^2 \left(\frac{3}{n_z^2 \pi^2} - 2 \right) \right). \quad (2.33)$$

Это выражение изображено на Рис.2.6.

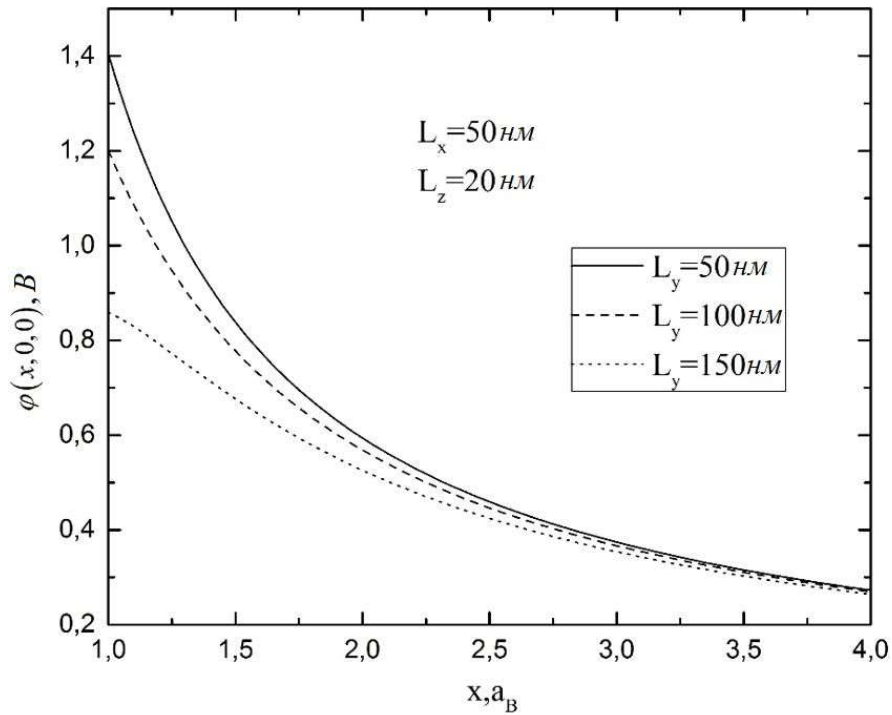


Рис.2.6. Зависимость электростатического потенциала от координаты x в единицах a_B .

Как следует из него, с ростом координаты потенциал монотонно спадает. При этом кривые соответствующие малым L_y лежат выше.

2.4 Межзонные переходы в квантовом штрихе в форме усеченной призмы

2.4.1. Режим сильного размерного квантования

Теперь перейдем к рассмотрению КШ, имеющего форму усеченной призмы (Рис. 2.7).

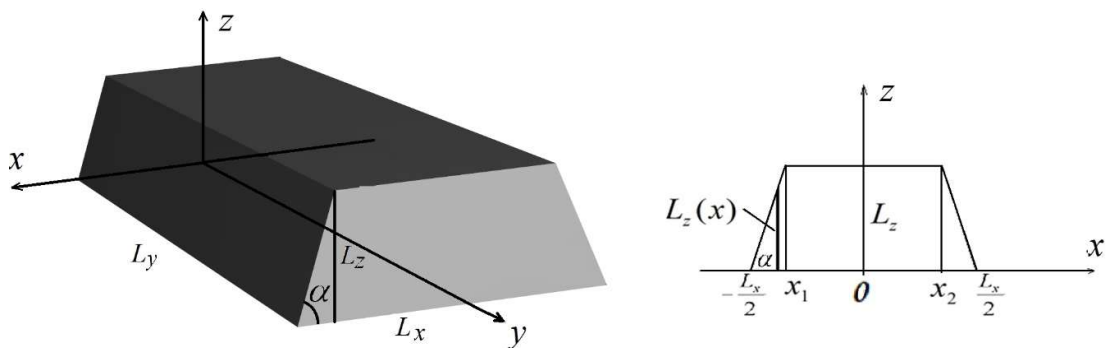


Рис.2.7. Схематическое изображение КШ, имеющего форму усеченной призмы.

Ограничивающий потенциал частицы (электрон, дырка) в декартовых координатах может быть представлен как:

$$V_{conf}(x, y, z) = \begin{cases} 0, & \text{inside } QD \\ \infty, & \text{outside } QD \end{cases}. \quad (2.34)$$

В режиме сильного РК энергия кулоновского взаимодействия между электроном и дырой намного меньше энергии, обусловленной РК. В этом приближении кулоновским взаимодействием между электроном и дырой можно пренебречь. В безразмерных величинах гамильтониан частицы имеет вид:

$$H = -\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) - \kappa \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad \kappa = \mu/\mu_z. \quad (2.35)$$

Исходя из геометрической формы КТ, следует, что движение частицы вдоль оси z происходит быстрее, чем в плоскости, перпендикулярной к ней. Это позволяет использовать геометрическое адиабатическое приближение [73], согласно которому полный гамильтониан системы можно представить в виде суммы гамильтонианов "быстрой" H_1 и "медленной" H_2 подсистем:

$$H = H_1 + H_2, \quad (2.36)$$

$$H_2 = -\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right). \quad (2.37)$$

Волновую функцию ищем в следующем виде:

$$\Phi(x, y, z) = \chi(z; x)\psi(x)\varphi(y), \quad (2.38)$$

где $\chi(z; x)$ - волновая функция «быстрой» подсистемы, $\psi(x)\varphi(y)$ - волновая функция «медленной» подсистемы. При фиксированном значении координаты x медленной подсистемы, движение частицы локализуется в одномерной квантовой яме с эффективной шириной $L_z(x)$:

$$L_z(x) = \begin{cases} (x + L_x/2)\text{tg}(\alpha), & x \in [-L_x/2, x_1] \\ L_z, & x \in [x_1, x_2] \\ (L_x/2 - x)\text{tg}(\alpha), & x \in [x_2, L_x/2]. \end{cases} \quad (2.39)$$

Здесь α - угол раствора призмы, где $x_1 = L_z \text{ctg}(\alpha) - L_x/2$, $x_2 = L_x/2 - L_z \text{ctg}(\alpha)$. В случае, когда $\alpha = \text{ArcTan}(2L_z/L_x)$ приходим к случаю не усечённой призмы. Согласно

уравнению Шредингера для «быстрой» подсистемы энергетический спектр и волновые функции имеют вид:

$$\varepsilon_{fast} = \frac{\kappa\pi^2 n_z^2}{L_z^2} = \frac{\kappa\pi^2 n_z^2}{L_z^2(x)}, \quad n_z = 1, 2, \dots, \quad \chi(z; x) = \sqrt{\frac{2}{L_z(x)}} \text{Sin} \left(\frac{\pi n_z z}{L_z(x)} + \frac{\pi n_z}{2} \right). \quad (2.40)$$

Согласно геометрическому адиабатическому методу, выражение энергии ε_{fast} служит эффективным потенциалом для уравнения Шредингера «медленной» подсистемы:

$$E_{eff} = \varepsilon_{fast} = \frac{\kappa\pi^2 n_z^2}{L_z^2(x)} = \begin{cases} \frac{\kappa\pi^2 n_z^2}{(x + L_x/2)^2 \text{tg}^2(\alpha)}, & x \in [-L_x/2, x_1] \\ \frac{\kappa\pi^2 n_z^2}{L_z^2}, & x \in [x_1, x_2] \\ \frac{\kappa\pi^2 n_z^2}{(L_x/2 - x)^2 \text{tg}^2(\alpha)}, & x \in [x_2, L_x/2] \end{cases}. \quad (2.41)$$

Эффективный потенциал для медленной подсистемы изображён на рис. 2.8.

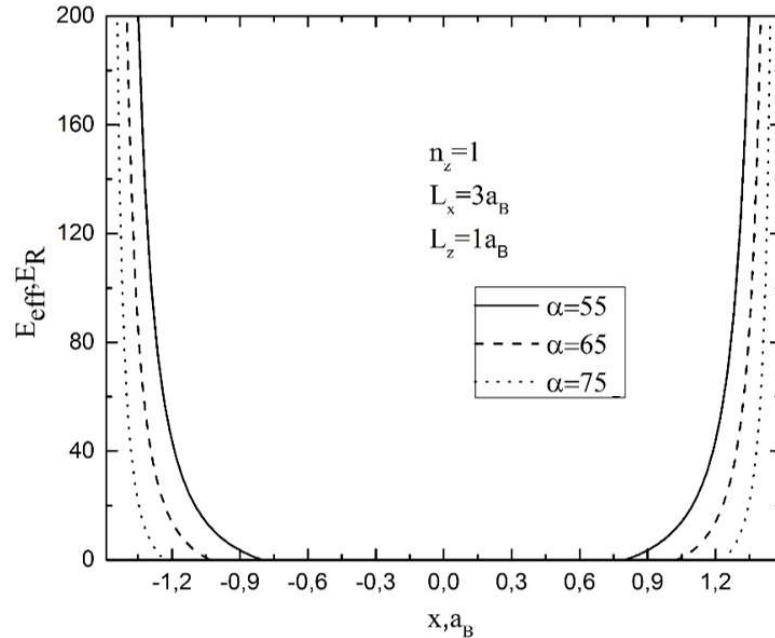


Рис. 2.8. Эффективный потенциал для медленной подсистемы.

Уравнение Шредингера для «медленной» подсистемы может быть записано в следующем виде:

$$\{H_2 + \varepsilon_{fast}(x)\} \psi(x) \varphi(y) = \varepsilon \psi(x) \varphi(y), \quad (2.42)$$

где $\varepsilon = \varepsilon_x + \varepsilon_y$ - полная энергия системы. Переменные в уравнении (2.42) разделяются, а энергетический спектр и волновые функции в направлении y имеют вид:

$$\varepsilon_y = \frac{\pi^2 n_y^2}{L_y^2}, n_y = 1, 2, \dots \quad \varphi(y) = \sqrt{\frac{2}{L_y}} \text{Sin} \left(\frac{\pi n_y y}{L_y} + \frac{\pi n_y}{2} \right). \quad (2.43)$$

В свою очередь уравнение Шредингера в направлении x имеет вид:

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \varepsilon_{fast}(x) \right\} \psi(x) - \varepsilon_x \psi(x) = 0. \quad (2.44)$$

Будем пользоваться методом вариации со следующей пробной волновой функцией:

$$\psi_{tr}(x, \lambda) = C(\lambda) \sin \left(\frac{\pi n_x x}{L_x} + \frac{\pi n_x}{2} \right) \exp \left(-\frac{\lambda^2 x^2}{2L_x^2} \right), n_x = 1, 2, \dots, \quad (2.45)$$

где λ - параметр вариации, $C(\lambda)$ - нормировочный коэффициент. Минимизация выражения $\langle \Psi^* | \hat{H}_2 | \Psi \rangle$ по параметру вариации даст энергию системы:

$$I(\lambda) = \frac{\langle \Psi^* | \hat{H}_2 | \Psi \rangle}{\langle \Psi^* | \Psi \rangle} \rightarrow \min. \quad (2.46)$$

Зависимость параметра вариации λ от угла призмы показана на Рис 2.9:

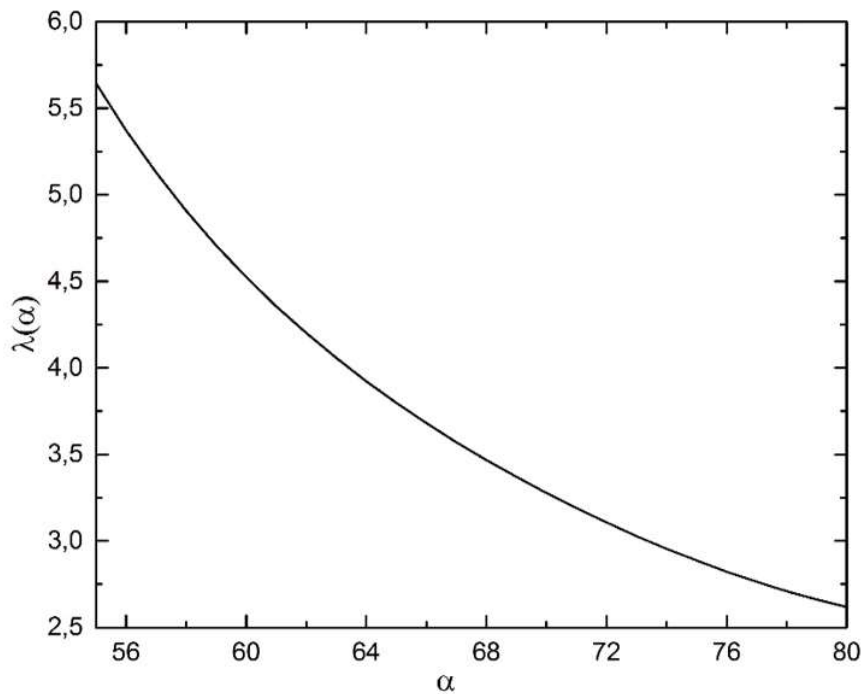


Рис. 2.9. Зависимость параметра вариации от угла призмы.

Как видно из Рис. 2.9, параметр вариации монотонно уменьшается с увеличением угла призмы и стремится к единице, когда угол стремится к 90 градусам.

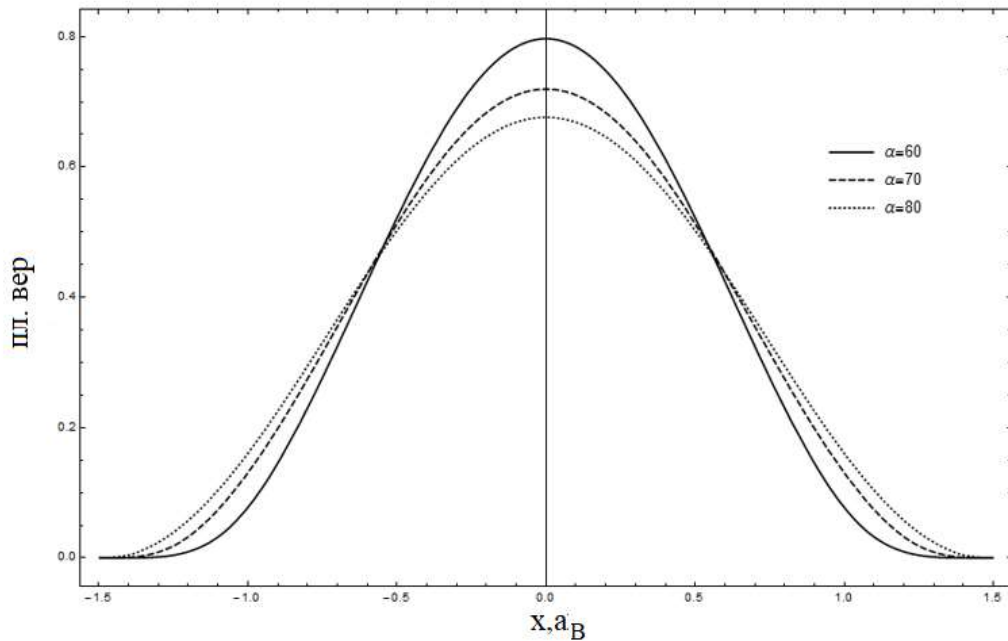


Рис. 2.10. Плотности вероятностей нахождения электрона в направлении x ($y = 0$) при разных значениях угла призмы.

Как видно из Рис. 2.10, с уменьшением угла призмы плотность вероятности увеличивается в центральной области и уменьшается в областях, близких к стенкам. Это связано с сильным отталкиванием стенок КШ, следовательно, более сильной локализацией в центре КШ.

2.4.2 Режим промежуточного размерного квантования

Теперь рассмотрим случай, когда $L_x, L_y \sim a_{ex}$, однако $L_z \ll a_{ex}$, то в направлении z мы имеем режим сильного РК, тогда как в плоскости xu реализуется промежуточный режим РК. В этой плоскости необходимо учитывать взаимодействие электрона и дырки. Эффективная масса электрона намного меньше эффективной массы тяжелой дырки, поэтому можно использовать адиабатическое приближение. При этом потенциал, действующий на дырку со стороны электрона, можно считать усредненным

по его движению [66]. Если движение электрона описывается волновой функцией $\Psi_{n_x, n_y}(\vec{r}_e)$, то потенциал, действующий на дырку в безразмерных величинах, равен [66]:

$$V_{n_x, n_y}(\vec{r}_h) = -2 \int \frac{|\Psi_{n_x, n_y}(\vec{r}_e)|^2}{|\vec{r}_h - \vec{r}_e|} d^2 \vec{r}_e, \quad (2.47)$$

Зафиксировав положение дырки, свяжем с ней систему координат, сделав преобразование $\vec{r} \rightarrow \vec{r} - \vec{r}_h$. Тогда для радиус-вектора электрона в такой системе координат получим: $\vec{r}_r \rightarrow \vec{r}_e - \vec{r}_h$. Электронная волновая функция основного состояния в плоскости $xу$:

$$\psi_{gr}(x, y) = N_0 e^{-\frac{y^2}{2L_y^2}} e^{-\frac{x^2 \lambda^2}{2L_x^2}} \cos\left(\frac{\pi x}{L_x}\right). \quad (2.48)$$

В полярных координатах это выражение будет иметь вид:

$$\psi_{gr}(\rho, \varphi, \vec{r}_h) = N_0 e^{-\frac{\lambda^2(x_h + \rho \cos \varphi)^2}{2L_x^2} - \frac{(y_h + \rho \sin \varphi)^2}{2L_y^2}} \cos\left(\frac{\pi(x_h + \rho \cos \varphi)}{L_x}\right). \quad (2.49)$$

Выражение (2.47) в указанной системе запишется как:

$$V_{gr}(\vec{r}_h) = -2 \int \frac{|\Psi_{gr}(\rho)|^2}{\rho} \rho d\rho d\varphi = -2 \int |\Psi_{gr}(\rho)|^2 d\rho d\varphi. \quad (2.50)$$

Максимум плотности вероятности электрона находится в центральной области КШ. Это означает, что как электрон, так и дырка в основном состоянии локализованы в центре КТ. Поэтому $|\psi_{gr}(\rho, \varphi, \vec{r}_h)|^2$ можно разложить в ряд по малым параметрам. В результате для $|\psi_{gr}(\rho, \varphi, \vec{r}_h)|^2$ получим:

$$\begin{aligned} & |\psi_{gr}(\rho, \varphi, \vec{r}_h)|^2 = \\ & \frac{-2x_h(2L_y^2 - y_h^2)(\pi^2 + \lambda^2)\rho \cos \varphi + (2L_x^2 - x_h^2(\pi^2 + \lambda^2))(2L_y^2 - y_h^2 - 2y_h \rho \sin \varphi)}{4L_x^2 L_y^2} \end{aligned} \quad (2.51)$$

N_0^2 можно найти из условия нормировки:

$$N_0^2 = \left(\int_0^{2\pi} \int_0^{\rho_{\max}} |\psi_{gr}(\rho, \varphi, \vec{r}_h = 0)|^2 \rho d\rho d\varphi \right)^{-1} = \frac{4\lambda^2}{\pi(L_x^2 + L_y^2 \lambda^2)}, \quad (2.52)$$

где $\rho_{\max} = \frac{1}{2}d$, $d = \sqrt{L_y^2 + \frac{L_x^2}{\lambda^2}}$. Интегрируя (2.50), получим:

$$\begin{aligned} V_{gr}(\vec{r}_h) &= -2N_0^2 \int_0^{2\pi} \int_0^{\rho_{\max}} |\psi_{gr}(\rho, \varphi, \vec{r}_h)|^2 d\rho d\varphi = \\ &= -\frac{8}{d} + \frac{8}{L_y^2 d} y_h^2 + \frac{4(\pi^2 + \lambda^2)}{L_x^2 d} x_h^2 - 2 \frac{(\pi^2 + \lambda^2)}{L_x^2 L_y^2 d} x_h^2 y_h^2. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Мы будем пренебрегать перекрестным членом, поэтому для потенциала, действующего на дырку, получаем:

$$V_{gr}(\vec{r}_h) = -A + B y_h^2 + C x_h^2, \quad A = \frac{8}{d}, \quad B = \frac{8}{L_y^2 d}, \quad C = \frac{4(\pi^2 + \lambda^2)}{L_x^2 d}. \quad (2.54)$$

Волновая функция и энергетический спектр дырки определяются путем решения уравнения Шредингера с дополнительным потенциалом (2.54). Это уравнение будет решаться численно. Электронная и дырочная волновые функции изображены на Рис. 2.11.

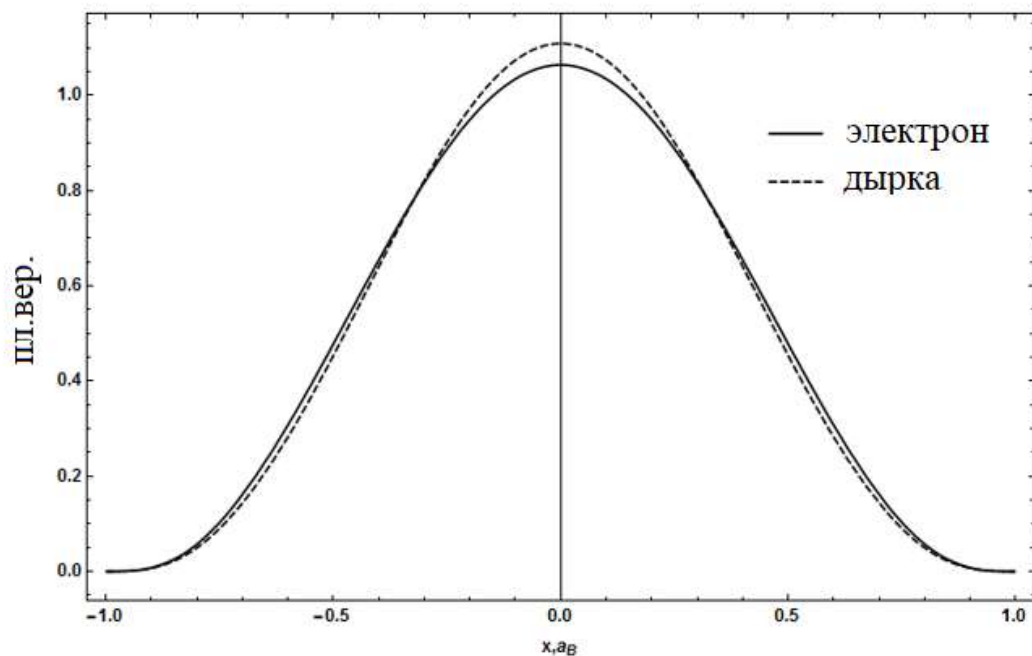


Рис. 2.11. Плотности вероятностей электрона и дырки в режиме промежуточного РК.

Как видно из Рис. 2.11, в промежуточном режиме электрон создает параболический потенциал, который стремится локализовать дырку в центре КШ.

2.4.3. Режим слабого размерного квантования

В этом режиме энергия связи экситона преобладает над энергией РК. Здесь рассмотрим движение центра масс и относительное движение электрона и дырки. Как и в предыдущем разделе, мы рассмотрим двумерный экситон в $x-y$ -плоскости и режим сильного РК в направлении z . Полная волновая функция будет иметь следующий вид:

$$f(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \varphi_{ex}(\vec{r}) \Psi_{n,l,m}(\vec{R}), \quad (2.55)$$

где $\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_h$, $\vec{R} = \frac{\mu_e \vec{r}_e + \mu_h \vec{r}_h}{\mu_e + \mu_h}$. Здесь $\varphi_{ex}(\vec{r})$ - описывает относительное движение электрона и дырки, а $\Psi_{n,l,m}(\vec{R})$ - описывает движение центра масс экситона в плоскости XOY . Гамильтониан системы будет иметь следующий вид:

$$H_{2D} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\vec{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu_c} \Delta_{\vec{r}}^2 - \frac{e^2}{\varepsilon|\vec{r}|}, \quad (2.56)$$

где $M = \mu_e + \mu_h$ - масса экситона, $\mu_c = \frac{\mu_e \mu_h}{\mu_e + \mu_h}$ - приведенная масса экситона. Для движения центра масс мы получим результат, аналогичный режиму сильного РК только с полной эффективной массой экситона. Для радиального уравнения относительного движения запишем:

$$R_{ex}''(r) + \frac{m^2 - 1/4}{r^2} R_{ex}(r) + \left(\frac{2}{r} - k^2 \right) R_{ex}(r) = 0, \quad -k^2 = \varepsilon_r'. \quad (2.57)$$

Решение этого уравнения можно выразить через функции Уиттекера M [53]. Функция Уиттекера W не удовлетворяет условию нормировки, так как она не сходится на бесконечности. Тогда для радиальной волновой функции без учета коэффициента нормировки получаем:

$$\Omega(r) = M_{1/k, i\sqrt{2m^2-1}/\sqrt{2}}(2kr), \quad (2.58)$$

Наконец, для энергетического спектра относительного движения экситона в безразмерных величинах получаем:

$$\varepsilon_r = -\frac{\mu_c}{\mu_e} \varepsilon_r' = -\frac{\mu_c}{\mu_e} \frac{1}{(q-1/2)^2}, \quad q = 1, 2, \dots, \quad (2.59)$$

где $q = n + m + 1$.

2.4.4. Оптические свойства

На рисунке 2.12 приведена зависимость силы осциллятора $f/f_0 = \left| \int \Psi_v^e \Psi_v^h d^3 \vec{r}_e d^3 \vec{r}_h \right|^2$ в промежуточном режиме РК от угла призмы, f_0 - сила осциллятора объемного материала.

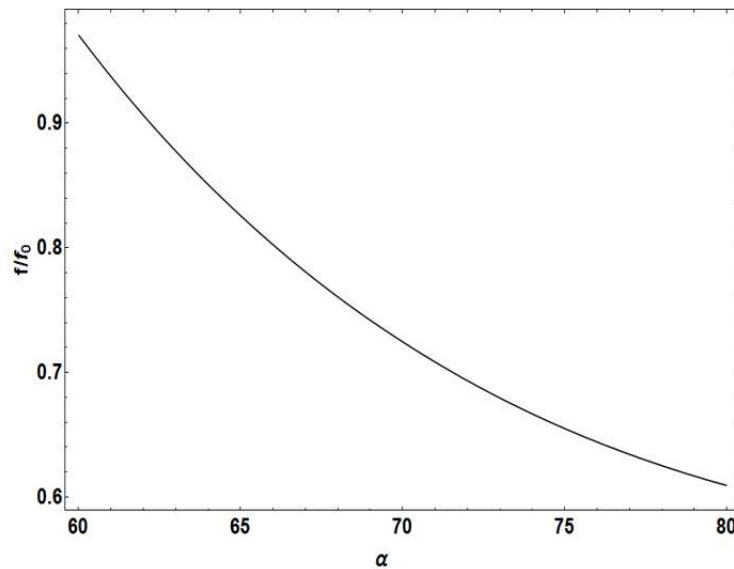


Рис. 2.12. Зависимость силы осциллятора для межзонных переходов в режиме промежуточного РК от угла призмы.

Как видно из Рис. 2.12, с увеличением угла раствора призмы уменьшается сила осциллятора для межзонных переходов. Это может быть объяснено тем фактом, что с увеличением угла раствора призмы увеличивается эффективная область локализации НЗ, эффект РК ослабевает и НЗ локализуются дальше друг от друга.

ГЛАВА III: ОПТИЧЕСКИЕ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЛОИСТЫХ И ТОРОИДАЛЬНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

3.1 Введение

В предыдущей главе нами рассматривались КШ, которые являются примечательными объектами с точки зрения оптоэлектроники ИК диапазона. Другими замечательными объектами, также реализованными сравнительно недавно, и ставшие предметом пристального изучения стали квантовые слои и кольцеобразные наноструктуры. Уникальность таких систем заключается в первую очередь в том, что с их помощью можно экспериментально подтвердить или опровергнуть ряд фундаментальных положений квантовой механики, в частности эффект Ааронова-Бома для связанных состояний [74]. Топология выколотого центра всегда играла существенную роль при формировании энергетического спектра той или иной квантовой системы.

С точки зрения эффекта РК, наличие подобных геометрий приводит к тому, что возникает необходимость учета двух граничных условий, а именно – на внутренней и внешней границах КТ. На языке математики это означает введение соответствующего потенциала ограничения для слоистой или же кольцеобразной наноструктур, учитывающего с одной стороны симметрию структуры, а с другой – специфику компонентного состава как самой структуры, так и окружающей ее среды.

При этом нанослой типа ядро/оболочка и ядро/оболочка/оболочка, продемонстрировали превосходные характеристики для применения в светодиодах, оптически накачанных лазерах, фотоэлектрических элементах, телекоммуникационных устройствах, а также биомедицине [75]. Методы синтеза коллоидных КТ типа ядро/оболочка позволяют реализовать образцы с низкой дисперсией по размерам структур (около 5% [76]) и высоким квантовым выходом (в диапазоне от 50 до 80 % [77,78]).

Для теоретического моделирования слоистых или кольцеобразных наноструктур в литературе были предложены различные потенциалы ограничения [14-18]. Так в работах [79,80] рассмотрена модель прямоугольной ямы. В работе [81] для описания слоистых структур был предложен молекулярный потенциал Кратцера. Одним из

используемых потенциалов для описания таких наноструктур является так называемый вулканоподобный потенциал или же потенциал Винтерница-Смординского [82,83] описывает не только наличие внутренней и внешней границ квантового кольца, но также позволяет описать асимметричное поведение точки минимума структуры [84,85]. Этот потенциал в сферической системе координат имеет следующий вид:

$$V_{conf}(r) = \frac{A}{r^2} + Br^2 - 2\sqrt{AB}, \quad (3.1)$$

где A и B являются константами, характеризующими наноструктуру, описываемую высотой потенциального скачка и ширины ямы на границах КТ.

Замечательным свойством энергетического спектра слоистых наноструктур является диаметрально противоположная зависимость одночастичных энергетических уровней от внешнего и внутреннего радиусов. При этом при фиксированном внутреннем радиусе с ростом внешнего, энергетические уровни опускаются, и наоборот, при фиксированном внешнем с ростом внутреннего уровни поднимаются. Это можно объяснить с помощью соотношения неопределенности Гейзенберга: с ростом ширины нанослоя увеличивается эффективная область локализации, из-за чего уровни энергии опускаются.

Ясно, что подобные обстоятельства позволяют манипулировать спектром слоистых наноструктур в довольно широком диапазоне энергий. Это, в свою очередь, отразится на всех физических характеристиках рассматриваемых образцов: оптических, кулоновских, термодинамических и т.д.

Исследование оптических свойств, в частности, спектра поглощения, фотолюминесценции (ФЛ) и фотоионизации (ФИ) примесей в полупроводниковых наноструктурах, является актуальной проблемой, поскольку основной областью применения низкоразмерных систем является оптоэлектроника, и понимание физических процессов, лежащих в основе оптоэлектронных приборов нового поколения, необходимо для их конструирования. Отметим также, что измерения спектров поглощения и ФЛ КТ являются основными экспериментальными методами получения информации о зонном строении таких структурах. Изучение зависимости спектров ФЛ от частоты падающего света, а также положения пика и формы кривых ФЛ в зависимости от основных геометрических параметров КТ и различных внешних воздействий было проведено в работах [86,87]. Например, интенсивность ФЛ

единичной КТ из CdSe под действием электрического поля была изучена в работе [86]. Кроме того, влияние взаимодействия электронно-дырочной пары и продольных оптических фононов на спектры ФЛ были рассмотрены в [87]. Одной из важнейших оптических характеристик примесных состояний в низкоразмерных системах является сечение фотоионизации. Нужно отметить, что в научной литературе примесь часто рассматривается локализованной в центре КТ, когда сохраняется сферическая симметрия задачи. Однако возможна ситуация, когда примесь смещена от центра, что может существенно повлиять на физические свойства рассматриваемых систем. Так, в частности, коэффициент оптического поглощения и изменение показателя преломления, связанное с межподзонами переходами в смещенной от центра водородоподобной примеси в сферической КТ были рассмотрены в [88]. В работе [89] были исследованы эффекты воздействия электрического поля и положения примеси на основное и первое возбужденное состояния водородоподобной примеси в сферической КТ типа ядро/оболочка. В работе [90] примесные состояния и процессы фотоионизации были рассмотрены теоретически в рамках вариационного метода. Авторами были получены зависимости сечения фотоионизации от энергии падающего фотона. Были рассмотрены эффекты высокочастотного электрического и интенсивного лазерного поля на сечение фотоионизации водородоподобной примеси в КТ.

Квантовые наноструктуры со сложной геометрией и топологией являются объектом изучения исследователей благодаря как их применениям, так и академической точке зрения. Кольцеобразные структуры находятся в центре внимания, так как в них имеется возможность наблюдать эффект Ааронова – Бома [74,91-93]. Такое большое внимание к подобным структурам было обусловлено тем, что в начале 2000-х их удалось получить экспериментально. В четвертом и пятом параграфах данной главы рассматриваются оптические и экситонные свойства, а также термодинамические и магнитные свойства слабовзаимодействующего электронного газа, находящегося в тороидальной КТ.

Недавно стало возможным экспериментально контролировать количество НЗ локализованных в КТ [94]. Поэтому наряду с электронными и оптическими свойствами в последние годы интенсивно изучаются термодинамические и магнитные характеристики КТ различных геометрических форм [95-99]. В частности, представляет интерес изучение термодинамических характеристик многоэлектронных

систем в слоистых системах. Так авторы [38] теоретически исследовали энергетическую зависимость, а также намагниченность нескольких взаимодействующих и невзаимодействующих электронов в квантовом кольце, находящихся в направленном перпендикулярно плоскости кольца магнитном поле. В [95] авторы продемонстрировали парамагнитно-диамагнитные характеристики параболической КТ, в которой рассмотрены как орбитальные, так и спиновые магнитные свойства двумерного электронного газа. Зависимости теплоемкости и энтропии от температуры в GaAs КТ в присутствии магнитного поля были рассчитаны с использованием метода канонического ансамбля в [96]. Те же авторы также вычислили магнитные свойства, такие как намагниченность и магнитная восприимчивость параболической КТ [97]. Тепловые и магнитные свойства цилиндрического КТ с асимметричным потенциалом ограничения при наличии внешних электрических и магнитных полей изучались в [98]. Статистические свойства двойной кольцевой квантовой точки GaAs при наличии внешних магнитных и электрических полей изучены в [99].

Третья глава диссертационной работы посвящена исследованию процессов ФИ, ФЛ в слоистых КТ, и статистических свойств слоистых КТ, а также исследуется оптическое межзонное поглощение и статистические свойства слабовзаимодействующего электронного газа в КТ, имеющей форму тороида.

3.2 Межзонное поглощение и экситонные эффекты в слоистых сферических квантовых точках

В данном разделе мы остановимся на изучении оптических свойств и экситонных состояний в сферической КТ ядро/оболочка/оболочка с потенциалом ограничения Винтерница-Сморозинского. Схематическое изображение потенциала ограничения, связанного с энергетическим профилем структуры $Ga_{1-x_1}Al_{x_1}As / GaAs / Ga_{1-x_2}Al_{x_2}As$, показано на рисунке 3.1.

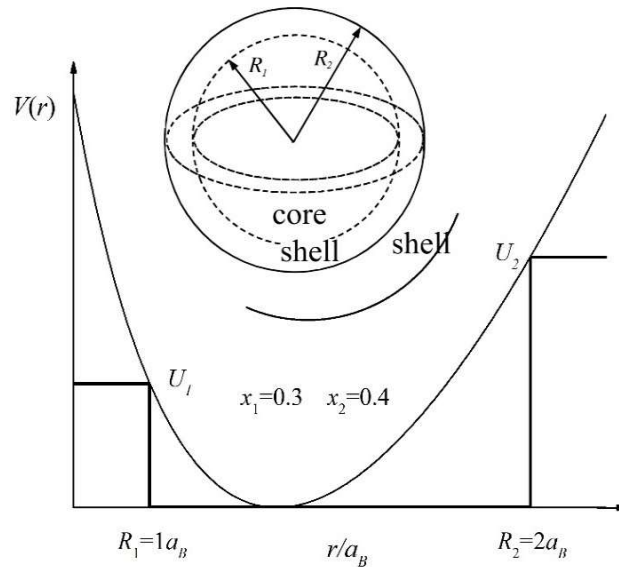


Рис. 3.1. Схематическое изображение потенциала ограничения, связанного с энергетическим профилем структуры.

Здесь x_1 и x_2 - концентрации Al в основной и внешней оболочках, соответственно. Заметим, что область внешней оболочки считается достаточно широкой по сравнению с первым слоем оболочки, таким образом, общий радиус наноструктуры можем считать R_2 . В прямозонном случае (концентрация Al считается меньше $x < 0.45$) зависимость ширины запрещенной зоны от концентрации определяется выражением $E_g (eV) = 1.424 + 1.247x$ [100]. Эффективную массу носителей заряда можно считать одинаковой во всей структуре при малых концентрациях Al , см. Табл. 3.1.

В случае, когда потенциал ограничения считается прямоугольным, нужно использовать условие сшивки волновой функции на границах КТ. Эти условия включают отношение эффективных масс в областях КТ. Отметим, что эффективные массы для электрона и дырки зависят от концентрации Al . Эта зависимость для $GaAs$ представлена в таблице 3.1.

x	m_h^*	m_e^*
0	0.067	0.51
0.1	0.075	0.53
0.2	0.083	0.55
0.3	0.092	0.57
0.4	0.100	0.59

Таблица 3.1. Зависимость эффективной массы электрона и дырки от концентрации (взято из [101]).

Для потенциала ограничения Винтерница-Сморозинского условия сшивки отсутствуют благодаря плавному характеру потенциала. Однако такой подход не приводит к большому рассогласованию из-за экспоненциального спада волновой функции в областях с концентрацией Al .

Заметим, что параметры A и B потенциала связаны с внешним и внутренним радиусами следующими соотношениями:

$$BR_i^2 + A/R_i^2 - 2\sqrt{AB} = U_i, i = 1, 2, \quad (3.2)$$

где U_i - смещения запрещенной зоны ($U_e = \Delta E_c$, $U_h = \Delta E_v$) и определяются соотношением $U_i = 211.9Q_i x_i$, где $Q_e = 0.63$ для электрона и $Q_h = 0.37$ для дырки [84,85]. Очевидно, что решения этой системы уравнений для электронов и дырок связаны между собой как $(A_h, B_h) = Q_h/Q_e (A_e, B_e)$. Решая эту систему уравнений для параметров Винтерница-Сморозинского, получим:

$$A_e = \frac{R_1^2 R_2^2 (R_2^2 U_1 + R_1^2 U_2 + 2R_1 R_2 \sqrt{U_1 U_2})}{(R_1^2 - R_2^2)^2}, \quad (3.3)$$

$$B_e = \frac{R_1^2 U_1 + R_2^2 U_2 + 2R_1 R_2 \sqrt{U_1 U_2}}{(R_1^2 - R_2^2)^2}.$$

Сначала рассмотрим режим сильного РК, когда мы можем пренебречь электронно-дырочным взаимодействием. В этом режиме проблема сводится к

решению одночастичной задачи. Радиальная часть уравнения Шредингера для электрона в безразмерных величинах будет иметь следующий вид:

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R(r) + \gamma \left(E' - \frac{A}{r^2} - Br^2 \right) R(r) = 0. \quad (3.4)$$

Здесь $R(r)$ - радиальная волновая функция, $\gamma = 1$ для электрона и $\gamma = m_h^*/m_e^*$ для дырки, где $m_{e(h)}^*$ - эффективная масса электрона (дырки). В уравнении $E' = E + 2\sqrt{AB}$, где E - энергия системы, ℓ - орбитальное квантовое число. Введем следующие обозначения:

$$\begin{aligned} 2s(2s+1) &= \ell(\ell+1) + A, \\ \frac{E'}{\sqrt{B}} &= 4(n_r + s) + 3. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Откуда запишем:

$$\begin{aligned} s &= \frac{1}{4} \left(-1 + \sqrt{(2\ell+1)^2 + 4A} \right), \\ n_r &= \frac{1}{4} \left(-2 + \sqrt{4A + (1+2\ell)^2} + \frac{E'}{\sqrt{B}} \right). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Спектр и решение уравнения (3.4) известны и даются следующими выражениями [53]:

$$E_{n_r, \ell} = \sqrt{B} \left\{ 4n_r + 2 + \sqrt{(2\ell+1)^2 + 4A} \right\} - 2\sqrt{AB}, \quad n_r = 0, 1, \dots, \quad (3.7)$$

где n_r - радиальное квантовое число. Заметим, что спектр (3.7) для случая $A = 0$ в точности совпадает с выражением энергии для сферического осциллятора:

$$E_N^{osc} = \sqrt{B} \{ 4n_r + 2\ell + 3 \} = 2\sqrt{B} \left(N + \frac{3}{2} \right), \quad (3.8)$$

где $N = 2n_r + \ell$ является главным квантовым числом. Соответствующие значения энергий основного состояния для разных внутренних и внешних радиусов представлены в таблице 3.2.

R_1/a_B	R_2/a_B	$A_e/E_R a_B^2$	$B_e/(E_R/a_B^2)$	$E_{0,0}/E_R$
1	1.5	392.9	161.1	23.45
1	2	179.9	39.1	11.77
1	3	104.1	9.4	5.91

Таблица 3.2 Параметры потенциала Винтерница-Сморodinского и значения энергий основного состояния для разных внутренних и внешних радиусов. Здесь значения концентраций Al $x_1 = x_2 = 0.4$.

Волновая функция в свою очередь будет иметь вид произведения угловой и радиальной частей:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = Y_{l,m}(\theta, \varphi) R(r), \quad (3.9)$$

где $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ - сферические гармоники, а для $R(r)$ имеем:

$$R(r) = e^{-\xi/2} \xi^s {}_1F_1\left(-n_r, 2s + \frac{3}{2}; \xi\right), \quad \xi = \sqrt{B}r^2 \quad (3.10)$$

Здесь ${}_1F_1(\alpha, \beta; x)$ - вырожденная гипергеометрическая функция первого рода.

Сравнение плотностей вероятности электронов и дырок приведено на рис. 3.2.

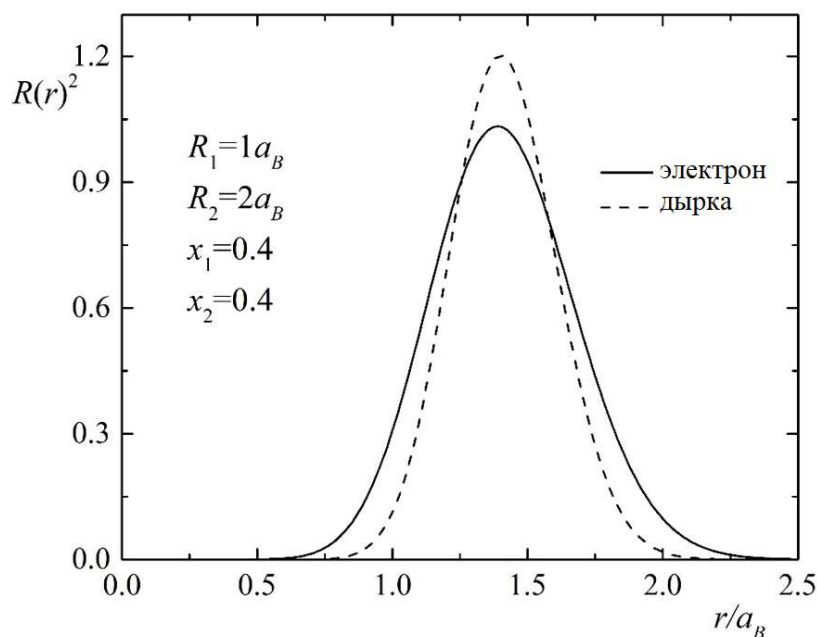


Рис. 3.2. Плотности вероятностей распределения электрона и дырки.

Как видно из рисунка 3.2, область локализации дырки уже, чем электрона. Это является отражением того факта, что параметры A и B для электрона и дырки имеют различные значения.

Рассмотрим теперь экситонные состояния в этой системе. Для описания электрон-дырочного взаимодействия в нашей системе мы будем использовать адиабатический подход, основанный на том, что эффективная масса электрона $\mu_e \ll \mu_h$. Это означает, что быстро движущийся электрон не «ощущает» присутствие тяжелой дыры. А дырка «движется» в эффективном потенциале, создаваемом электроном. Эффективный потенциал, действующий на дырку, имеет следующий вид [66]:

$$V_{0,0,0}(\vec{r}_h) = -2 \int \frac{|\Psi(\vec{r}_e)|^2}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} d^3\vec{r}_e. \quad (3.11)$$

Нормированная волновая функция основного состояния в этом случае может быть записана как:

$$\Psi_{0,0,0}(r, \theta, \varphi) = B^{3/8} \left(2\pi \Gamma\left(1 + \frac{1}{2}\sqrt{1+4A}\right) \right)^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{2}\sqrt{B}r^2\right) (\sqrt{B}r^2)^{\frac{1}{4}(-1+\sqrt{1+4A})}. \quad (3.12)$$

Интеграл (3.11) для основного состояния можно вычислить аналитически. Для такого состояния расстояние между частицами можно определить, как:

$$\frac{1}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{r_e^2 + r_h^2 - 2r_e r_h \cos \theta}}. \quad (3.13)$$

Используя следующее соотношение (см. дополнение):

$$\int_0^\pi \frac{\sin \theta}{\sqrt{r_e^2 + r_h^2 - 2r_e r_h \cos \theta}} d\theta = \begin{cases} \frac{2}{r_e}, & r_h < r_e \\ \frac{2}{r_h}, & r_e < r_h \end{cases}, \quad (3.14)$$

для интеграла (3.11) получим следующее выражение:

$$V_{0,0,0}(r_h) = -\frac{2}{r_h} - \frac{2(B^{1/4}r_h - 1)\Gamma\left(1 + \frac{1}{2}\sqrt{1+4A}, \sqrt{B}r_h^2\right)}{r_h \Gamma\left(1 + \frac{1}{2}\sqrt{1+4A}\right)}. \quad (3.15)$$

Здесь $\Gamma(a, x)$ является неполной гамма-функцией. Различие между потенциалами, действующими на дырку с учетом и без учета электронно-дырочного взаимодействия, показано на рисунке 3.3. Разница возникает из-за эффективного потенциала (3.15) (см. вставку на Рис. 3.3).

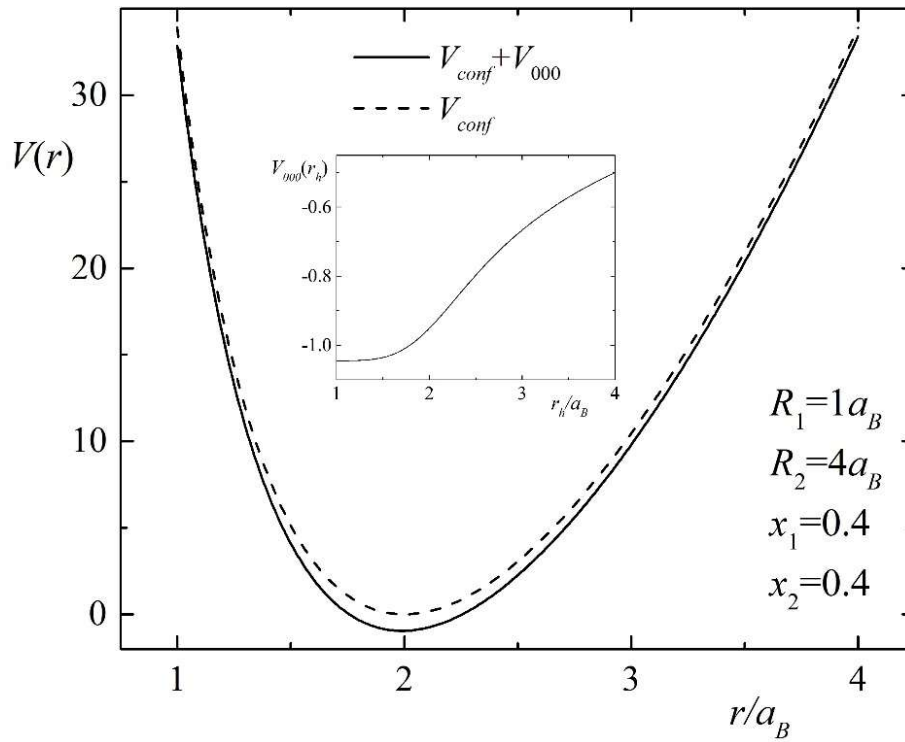


Рис. 3.3. Потенциалы, действующие на дырку с учетом (сплошная линия) и без учета (пунктирная линия) электронно-дырочного взаимодействия.

Рассмотрим прямое межзонное оптическое поглощение в режиме сильного РК ансамбля КТ типа ядро/оболочка/оболочка с учетом дисперсии их размеров, когда мы можем пренебречь экситонными эффектами. Как уже было указано во второй главе, для коэффициента поглощения света в режиме сильного РК имеем следующее выражение:

$$K(\omega) = K_0 \int \sum_{v_e, v_h} J_{v_e, v_h}^2 P_{LS}(u) \delta(\hbar\omega - E_g - E_{v_e}^e - E_{v_h}^h) du, \quad (3.16)$$

где J_{v_e, v_h} - безразмерная сила осциллятора, определяемая следующим образом:

$$J_{v_e, v_h} = f_{v_e, v_h} / f_0 = \int \Psi_e(\vec{r}_e) \Psi_h(\vec{r}_h) dV, \quad (3.17)$$

где f_0 - сила осциллятора объемного материала, $P_{LS}(u)$ - функция распределения Лифшица-Слезова. Из аргумента дельта-функции можно легко определить край поглощения, зависимость от радиуса оболочки которого показана на рисунке 3.4.

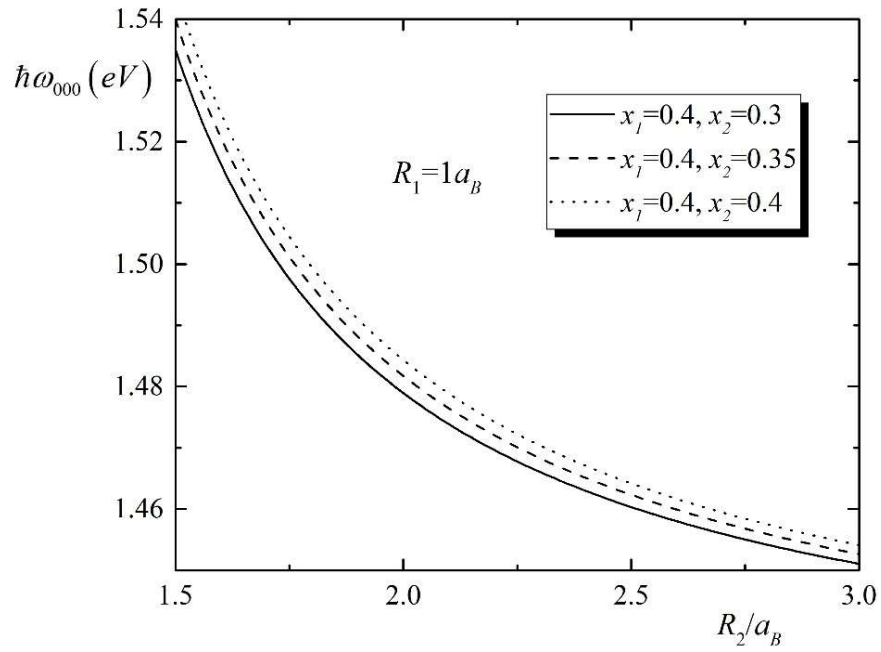


Рис 3.4. Зависимость края поглощения от внешнего радиуса оболочки.

Из рисунка 3.4 видно, что край поглощения уменьшается с увеличением внешнего радиуса. Кривые, соответствующие большим значениям концентрации алюминия в области оболочки, расположены выше. Сила осциллятора (3.17) в сильном режиме РК может быть представлена в виде следующего выражения:

$$J_{\nu_e, \nu_h} = \int_{\Omega=4\pi} Y_{\ell_e, m_e}(\theta, \varphi) Y_{\ell_h, m_h}(\theta, \varphi) d\Omega \int_0^{\infty} R_{n_e, \ell_e}(r) R_{n_h, \ell_h}(r) r^2 dr, \quad (3.18)$$

где $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ - элемент телесного угла. Первый интеграл в (3.18) можно легко вычислить:

$$\int_{\Omega=4\pi} Y_{\ell_e, m_e}(\theta, \varphi) Y_{\ell_h, m_h}(\theta, \varphi) d\Omega = \delta_{\ell_e, \ell_h} \delta_{m_e, m_h}, \quad (3.19)$$

Из (3.19) можно определить правила отбора для орбитального и магнитного квантовых чисел:

$$\begin{aligned} \ell_e &= \ell_h, \\ m_e &= -m_h. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Радиальная часть выражения (3.18) не может быть вычислена аналитически, поэтому ее необходимо определить численно. Заметим, что для $n_e \neq n_h$ интеграл отличен от нуля, однако для таких переходов он сравнительно мал (см. Табл. 3.3).

n_e, n_h	$f_{n_e, n_h} / f_0$
$n_e = 0, n_h = 0$	0.914
$n_e = 1, n_h = 1$	0.744
$n_e = 1, n_h = 0$	0.141
$n_e = 2, n_h = 0$	0.348
$n_e = 2, n_h = 1$	0.341

Таблица 3.3. Значения силы осциллятора для различных радиальных квантовых чисел. Здесь значения концентраций алюминия $x_1 = x_2 = 0.4$, а радиусы $R_1 = 1$, $R_2 = 2$.

Чтобы описать разброс ширин квантового нанослоя около средних значений, мы будем использовать распределение Гаусса. Функция распределения в таком случае будет иметь вид:

$$P(u) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(u-1)^2}{2\sigma^2}\right], \quad (3.21)$$

В (3.21) переменная u представляет собой отношение дисперсионных параметров к их средним значениям $u = R_2 - R_1 / \sqrt{R_2 - R_1}$, а σ является стандартным отклонением. После учета функции распределения можно получить зависимость коэффициента поглощения от энергии падающего фотона (см. Рис. 3.5).

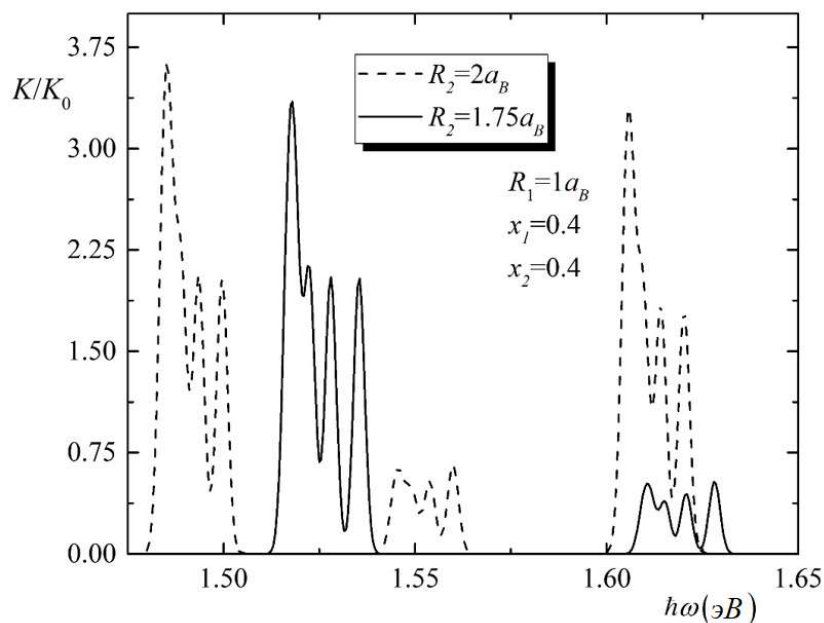


Рис. 3.5. Зависимость коэффициента поглощения от энергии падающего фотона.

На рисунке 3.5 показано, что существует множество пиков, соответствующих квантовым переходам между энергетическими уровнями электронов и дырок. Первый набор пиков соответствует переходам $n_h = 0 \rightarrow n_e = 0$. Пики в этом наборе соответствуют переходам с разными значениями орбитального квантового числа ℓ . Второй набор пиков происходит из наложения переходов $n_h = 1 \rightarrow n_e = 0$ и $n_h = 0 \rightarrow n_e = 1$. Интересно, что интенсивность этих пиков не равна нулю. Это связано с асимметрией потенциала ограничения Винтерница-Сморозинского. Интенсивность третьего набора пиков меньше, чем первого. Такая же картина наблюдается для второй кривой поглощения, соответствующей меньшему значению внешнего радиуса, за исключением того, что имеется сдвиг в область больших энергий.

Спектр ФЛ будет рассчитан, используя соотношение Руосбрук-Шокли [38,39] (см. Рис. 3.6):

$$R(\hbar\omega) = R_0 \hbar\omega K(\hbar\omega) \frac{f_c(1-f_v)}{f_v - f_c}, \quad (3.22)$$

где R_0 - величина, пропорциональная квадрату модуля матричного элемента дипольного момента, взятого по блоховским функциям, f_c и $1-f_v$ являются вероятностями того, что начальное состояние занято, а конечное свободно. Для

достаточно высоких температур множитель в соотношении Руосбрук-Шокли $\frac{f_c(1-f_v)}{f_v-f_c}$ может быть заменен экспонентой. По этой причине имеет место экспоненциальный характер высот пиков ФЛ. Заметим, что кривая фотолюминесценции рассчитана для комнатной температуры.

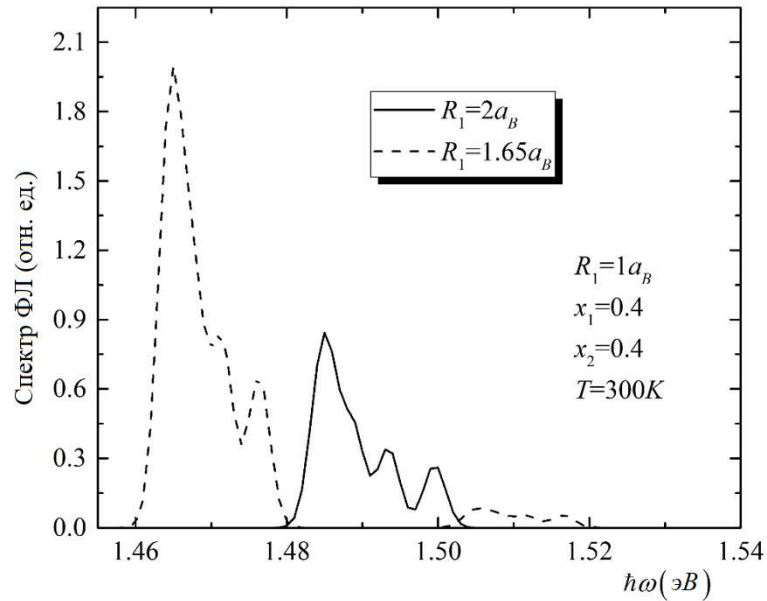


Рис. 3.6. Спектр фотолюминесценции сферического квантового слоя с ограничивающим потенциалом Винтерница-Сморозинского.

3.3 Квантовый сферический слой со смещенной от центра примесью

3.3.1 Режим сильного размерного квантования

Рассмотрим квантовый сферический слой (Рис.3.7). В этом подпараграфе будем рассматривать слои малых размеров $R_2 < a_B$ так, чтобы выполнялся режим сильного РК.

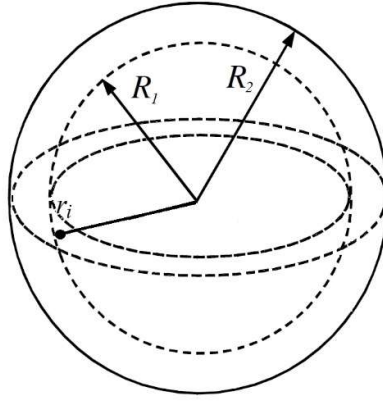


Рис. 3.7. Схематическое изображение квантового сферического слоя со смещенной от центра примесью.

Обратимся к задаче о нахождении спектра энергии и волновых функций квантового сферического слоя без примеси. Для нахождения огибающих волновых функций рассмотрим уравнение Шредингера со следующим Гамильтонианом:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V_{conf}(r), \quad (3.23)$$

где μ - эффективная масса электрона, а $V_{conf}(\vec{r})$ имеет вид бесконечно глубокой ямы:

$$V_{conf} = \begin{cases} 0, & R_1 \leq r \leq R_2 \\ \infty, & r \notin [R_1, R_2] \end{cases}. \quad (3.24)$$

В безразмерных величинах уравнение Шредингера внутри области слоя имеет вид:

$$-\Delta \Psi_{n,\ell,m}^{(0)}(r, \theta, \varphi) = E \Psi_{n,\ell,m}^{(0)}(r, \theta, \varphi), \quad (3.25)$$

где E - энергия РК, $\Psi^{(0)}$ - волновая функция, n - радиальное, ℓ - орбитальное и m - азимутальное квантовые числа. Волновую функцию будем искать в виде:

$$\Psi_{n,\ell,m}^{(0)}(r, \theta, \varphi) = f_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi). \quad (3.26)$$

Для радиального уравнения получим:

$$-\frac{d^2 f}{dr^2} - \frac{2}{r} \frac{df}{dr} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} f - k^2 f(r) = 0, \quad (3.27)$$

где $k = \sqrt{E}$. Решением этого уравнения являются сферические функции Бесселя:

$$f_{n,\ell}(r) = C_1 J_\ell(kr) + C_2 Y_\ell(kr), \quad (3.28)$$

где C_1, C_2 - константы, $J_\ell(kr), Y_\ell(kr)$ - сферические функции Бесселя первого и второго рода соответственно. Так как мы рассматриваем бесконечно глубокий

потенциал, то волновая функция на границе сферического слоя должна обращаться в ноль:

$$\Psi^{(0)}(R_1) = \Psi^{(0)}(R_2) = 0. \quad (3.29)$$

Для системы уравнений (3.29) имеем нетривиальные решения, если детерминант коэффициентов при C_1 и C_2 равен нулю.

$$\det = \begin{vmatrix} J_\ell(kR_1) & Y_\ell(kR_1) \\ J_\ell(kR_2) & Y_\ell(kR_2) \end{vmatrix} = 0. \quad (3.30)$$

Ясно, что коэффициенты C_1 и C_2 зависят друг от друга, поэтому достаточно определить один из них. Тогда радиальная волновая функция может быть представлена в следующем виде:

$$f_{n,\ell}(r) = A(J_\ell(kr) + CY_\ell(kr)), \quad (3.31)$$

где $A = \left(\int_{R_1}^{R_2} f_{n,\ell}^2 r^2 dr \right)^{-1/2}$ - коэффициент нормировки, а $C = -J_\ell(kR_1)/Y_\ell(kR_1)$. На Рис. 3.8

представлены радиальные плотности вероятности нахождения электрона внутри сферического слоя.

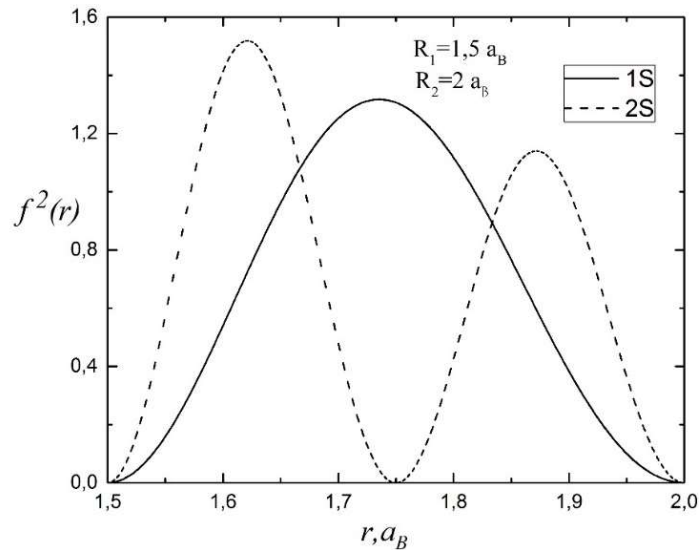


Рис. 3.8. Плотность радиального распределения вероятности нахождения электрона в сферическом слое для различных состояний при фиксированных $R_1 = 1.5a_B$, $R_2 = 2a_B$.

Рассмотрим эту задачу при наличии примеси в рамках теории возмущений. Потенциал примеси в безразмерных величинах имеет вид:

$$V(\vec{r}_i, \vec{r}) = -2/r_{12}, \quad (3.32)$$

где $r_{12} = |\vec{r} - \vec{r}_i| = \sqrt{r^2 + r_i^2 - 2rr_i(\cos\phi\cos\phi_i + \cos(\theta - \theta_i)\sin\phi\sin\phi_i)}$. В рамках теории возмущений поправка к энергии будет иметь вид:

$$\Delta E_{n,\ell,m}^{(1)} = \left\langle \Psi_{n,\ell,m}^{(0)*} \left| -\frac{2}{r_{12}} \right| \Psi_{n,\ell,m}^{(0)} \right\rangle. \quad (3.33)$$

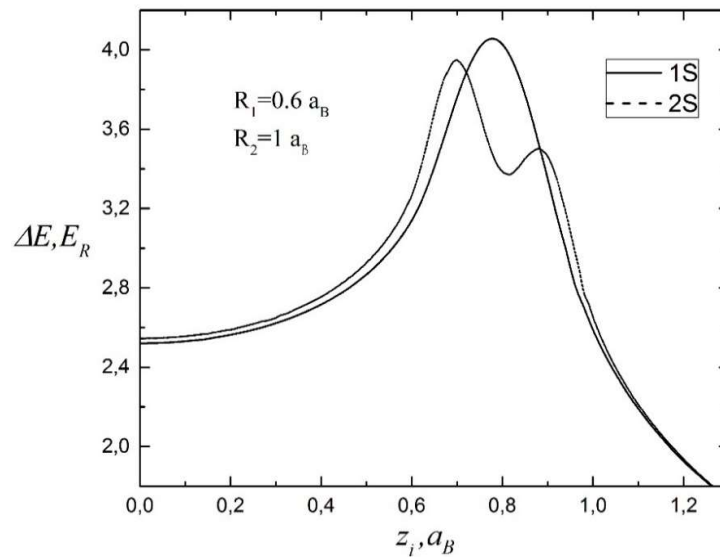


Рис. 3.9. Зависимость энергии связи от положения примеси, рассчитанная в рамках теории возмущений.

На Рис. 3.9 изображена зависимость энергии связи от положения примеси вдоль оси z в сферическом нанослое. Как можно видеть из рисунка, кривая основного состояния монотонно возрастает, когда примесь находится в области ядра и достигает своего максимума, когда примесь находится в центре слоя. С дальнейшим увеличением смещения примеси вдоль оси z , энергия связи монотонно падает. Это объясняется тем, что электрон в основном состоянии локализован в центре сферического слоя и, следовательно, энергия связи примеси и электрона наибольшая, когда примесь также находится в центре сферического слоя. Кривая зависимости энергии связи от расположения примеси вдоль оси z в состоянии 2S также монотонно возрастает, когда примесь находится в области ядра. Однако здесь имеем два максимума, причем первый

расположен выше второго. Это также объясняется локализацией электрона в состоянии 2S (см. Рис. 3.8).

3.3.2 Режим промежуточного размерного квантования

Как показывает численный анализ, теория возмущений работает только в случае малых сферических слоев. Однако, даже при относительно небольших радиусах, теория возмущений не описывает реального поведения электрона при наличии примеси. Отметим также, что смещение примеси от центра нарушает сферическую симметрию, и разногласие результатов теории возмущений с численными результатами становится больше.

Для преодоления данной проблемы в следующем подпараграфе будем использовать вариационный метод. Перед непосредственным переходом к рассмотрению смещенной примеси в рамках вариационного метода проведем определенные математические выкладки и упрощения, а также выберем вид пробной волновой функции.

3.3.3 Двухчастичная корреляционная функция

Рассмотрим систему двух частиц, гамильтониан которой может быть записан в следующем виде:

$$\hat{H} = -\Delta_1 - \Delta_2 + \hat{V}, \quad (3.34)$$

где Δ_1, Δ_2 - лапласианы в пространстве координат первой \vec{r}_1 и второй \vec{r}_2 частиц, \hat{V} - оператор взаимодействия частиц. Сделаем следующие обозначения, введя шестимерный градиент и лапласиан:

$$\vec{\nabla} = \vec{\nabla}_1 + \vec{\nabla}_2 = \sum_{i_1=x_1, y_1, z_1} \frac{\partial}{\partial i_1} + \sum_{i_2=x_2, y_2, z_2} \frac{\partial}{\partial i_2}; \Delta = \vec{\nabla}^2. \quad (3.35)$$

Двухчастичную волновую функцию запишем в виде произведения:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (3.36)$$

где $\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ - волновая функция системы, когда взаимодействие между частицами отсутствует, $\chi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ - корреляционная функция. Значение энергии в состоянии $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ можно определить как:

$$\begin{aligned}
E &= \int_V \Psi^* (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \hat{H} \Psi (\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\tau = \int_V \varphi \chi \hat{H} \varphi \chi d\tau \\
&= \int_V -\varphi \chi \Delta \varphi \chi + \varphi \chi V \varphi \chi d\tau
\end{aligned} \tag{3.37}$$

где $d\tau = dV_1 dV_2$ - элемент объема в шестимерном пространстве, а интегрирование идет по всему объему КТ. Используем следующее свойство многомерного лапласиана для произведения двух функций:

$$\Delta \varphi \chi = \varphi \Delta \chi + \chi \Delta \varphi + 2 \vec{\nabla} \varphi \vec{\nabla} \chi, \tag{3.38}$$

запишем (3.37) в виде:

$$E = \int_V \varphi \chi \left(-\varphi \Delta \chi - \chi \Delta \varphi - 2 \vec{\nabla} \varphi \vec{\nabla} \chi \right) + V \varphi^2 \chi^2 d\tau. \tag{3.39}$$

Используя свойство $\vec{\nabla} f g = f \vec{\nabla} g + g \vec{\nabla} f \Rightarrow \vec{\nabla} f^2 = 2 f \vec{\nabla} f$ для третьего члена первого интеграла $-2 \int_V \varphi \chi \vec{\nabla} \varphi \vec{\nabla} \chi d\tau$ получим:

$$-2 \frac{1}{4} \int_V \varphi \chi \vec{\nabla} \varphi \vec{\nabla} \chi d\tau = -2 \frac{1}{4} \int_V 2 \varphi \vec{\nabla} \varphi \cdot 2 \chi \vec{\nabla} \chi d\tau = -2 \frac{1}{4} \int_V \vec{\nabla} \varphi^2 \cdot \vec{\nabla} \chi^2 d\tau. \tag{3.40}$$

Используя Формулу Грина: $\int_V \vec{\nabla} f \vec{\nabla} g d\tau = \int_{\partial V} f \vec{\nabla} g d\vec{s} - \int_V f \Delta g d\tau$ для выражения (3.40)

получим:

$$-2 \frac{1}{4} \int_V \vec{\nabla} \varphi^2 \vec{\nabla} \chi^2 d\tau = -2 \left(\frac{1}{4} \int_{\partial V} \varphi^2 \vec{\nabla} \chi^2 d\vec{s} - \frac{1}{4} \int_V \varphi^2 \Delta \chi^2 d\tau \right). \tag{3.41}$$

Если предположить, что волновая функция $\Psi (\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0$ равна нулю на поверхности КТ, то есть, если мы рассматриваем КТ с непроницаемыми стенками, тогда:

$$\frac{1}{4} \int_{\partial V} \varphi^2 \vec{\nabla} \chi^2 d\vec{s} = 0. \tag{3.42}$$

Таким образом, учитывая соотношение $\Delta \chi^2 = 2 \vec{\nabla} \chi \vec{\nabla} \chi + 2 \chi \Delta \chi$, выражение (3.41) запишется в виде:

$$\int_V \varphi^2 \left(\vec{\nabla} \chi \vec{\nabla} \chi + \chi \Delta \chi \right) d\tau. \tag{3.43}$$

Таким образом для полной энергии окончательно получим:

$$\begin{aligned}
E &= \int_V -\phi^2 \chi \Delta \chi - \chi^2 \Delta \phi + \phi^2 \vec{\nabla} \chi \vec{\nabla} \chi + \phi^2 \chi \Delta \chi + V \phi^2 \chi^2 d\tau = \\
&= \int_V -\chi^2 \Delta \phi + \phi^2 \vec{\nabla} \chi \vec{\nabla} \chi + V \phi^2 \chi^2 d\tau.
\end{aligned} \tag{3.44}$$

Так как $\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ является решением задачи, когда взаимодействие между частицами отсутствует, тогда получим $-\Delta \phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E_0 \phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, где E_0 - суммарная энергия частиц, не взаимодействующих между собой. Тогда окончательно запишем выражение, минимизация которого должна быть проведена для нахождения параметров вариации [102]:

$$E = E_0 + \frac{\int_V \phi^2 \vec{\nabla} \chi \vec{\nabla} \chi + V \phi^2 \chi^2 d\tau}{\int_V \phi^2 \chi^2 d\tau}. \tag{3.45}$$

Теперь перейдем к рассмотрению вида корреляционной функции электрона в поле примеси. Оператор взаимодействия в этом случае имеет вид $V(\vec{r}_i, \vec{r}) = -\frac{2}{|\vec{r} - \vec{r}_i|} = -\frac{2}{r_{12}}$. Ясно, что в области $r_{12} \ll r_1, r_2$, то есть вблизи примеси взаимодействие будет проявляться особенно ярко, так как будет доминировать $1/r_{12}$. Т. Като [103] показал, что:

$$\lim_{r_{12} \rightarrow 0} \frac{\partial \Psi}{\partial r_2} = -\frac{1}{2} \Psi(r_{12} = 0), \tag{3.46}$$

где $1/2$ появляется из выражения для приведенной массы двух частиц. Разложение общей волновой функции при малых r_{12} будет иметь вид [104]:

$$\Psi \xrightarrow{r_{12} \rightarrow 0} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left(1 - \frac{1}{2} r_{12}\right). \tag{3.47}$$

Корреляционную функцию, исходя из того, что она должна в пределе переходить в (3.47), выберем в следующем виде:

$$\chi(r_{12}) = 1 - \frac{1}{2} r_{12} \text{Exp}(-r_{12}/\lambda^2), \tag{3.48}$$

где λ - вариационный параметр.

Результаты численных расчетов нахождения минимума энергии и соответствующего параметра вариации приведены ниже. На Рис 3.10 приведены

плотности вероятности локализации электрона в сечении сферического слоя для различных положений примеси.

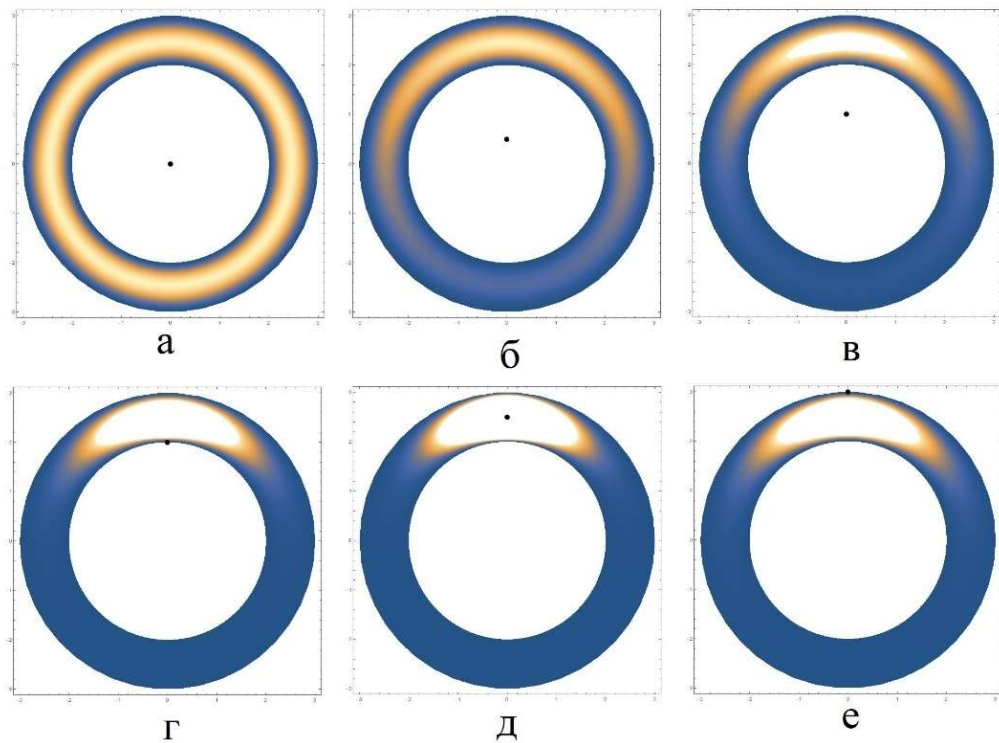


Рис. 3.10. Плотность вероятности локализации электрона в сечении сферического слоя для различных положений примеси z_i равных 0(а), 0.5(б), 1(в), 2(г), 2.5(д), 3(е).

Как видно из рисунка, параллельно со смещением электрон локализуется ближе к примеси. Причем если примесь не находится в начале координат, то нарушается сферическая симметрия. Максимально сильно электрон связан в случае, когда примесь находится в посередине слоя.

3.3.4 Сечение фотоионизации

В низкоразмерных нанoeлектронных системах процесс фотоионизации описывается как оптический переход, который происходит из основного примесного состояния в подзону проводимости [105]. Сечение фотоионизации может быть определено как вероятность перехода с основного состояния в континуум подзон под воздействием оптического возбуждения. В КТ этот переход требует более высокоэнергетических фотонов, чем в квантовых ямах и квантовых проволоках.

Зависимость сечения фотоионизации от энергии падающего фотона можно получить из золотого правила Ферми. В дипольном приближении для сечения фотоионизации имеем [106]:

$$\sigma(\hbar\omega) = \sigma_0 \hbar\omega \sum_f D_{if}^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \quad (3.49)$$

где Ψ_f, E_f и Ψ_i, E_i - волновые функции и энергии конечного и начального состояний, соответственно, $D_{if} = \langle \Psi_i | \vec{r} | \Psi_f \rangle$ - дипольный момент перехода, $\hbar\omega$ - энергия падающего фотона,

$$\sigma_0 = \left[\left(F_{eff}/F_0 \right)^2 \frac{n}{\varepsilon} \right] \frac{4\pi^2}{3} \alpha, \quad (3.50)$$

где $\alpha = e^2/\hbar c$ - константа тонкой структуры, n - коэффициент преломления, ε - диэлектрическая постоянная материала КТ, F_{eff}/F_0 - отношение эффективного электромагнитного поля к среднему характерному полю среды [106], имеющее значение порядка единицы. Заменяем дельта функцию, обеспечивающую закон сохранения энергии, (3.49) узким лоренцовым контуром:

$$\delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \rightarrow \frac{\hbar\Gamma}{\pi \left((\hbar\omega - (E_f - E_i))^2 + (\hbar\Gamma)^2 \right)}, \quad (3.51)$$

где Γ определяет ширину Лоренцева контура водородоподобной примеси. В расчетах положим $\Gamma = 0,1$. Предположим, что падающий фотон поляризован в направлении z , тогда $D_{if} = \langle \Psi_i | z | \Psi_f \rangle$. Ясно, что в случае сильного РК имеют место определенные правила отбора. Сразу видно, что возможны переходы только тогда, когда $m_1 = -m_2$, т.к. интеграл $\int e^{im_1\varphi} e^{im_2\varphi} d\varphi$ отличен от нуля при $m_1 = -m_2$. Используя хорошо известное свойство сферических функций:

$$\cos\theta Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = B_{\ell-1,m} Y_{\ell-1,m}(\theta, \varphi) + B_{\ell,m} Y_{\ell+1,m}(\theta, \varphi), \quad (3.52)$$

где $B_{\ell,m} = \left(\frac{(\ell+1)^2 - m^2}{(2\ell+1)(2\ell+3)} \right)^{1/2}$,

дипольный момент может быть записан как:

$$D_{if} = I \int_{\ell_1, \ell_2, m} f_{n_1, \ell_1} f_{n_2, \ell_2} r^3 dr, \quad (3.53)$$

где

$$I_{\ell_1, \ell_2, m_1} = \begin{cases} a_{\ell_2, m_1}, & \ell_2 = \ell_1 - 1 \\ a_{\ell_2 - 1, m_1}, & \ell_2 = \ell_1 + 1 \end{cases}, \quad a_{\ell, m} = \sqrt{\frac{(\ell + m + 1)(\ell - m + 1)}{(2\ell + 1)(2\ell + 3)}}. \quad (3.54)$$

Таким образом, переходами с ненулевой вероятностью являются те, для которых соблюдаются следующие правила отбора:

$$\Delta\ell = \pm 1, \quad m_2 = -m_1. \quad (3.55)$$

В режиме промежуточного и слабого квантований интеграл D_{if} должен быть рассчитан численно.

На рисунке 3.11 представлены зависимости сечения фотоионизации от энергии падающего фотона для различных значений смещения примеси вдоль оси z . Как видно из рисунка, смещение примеси приводит к смещению пороговой частоты в область высоких частот, а также к увеличению высоты пика, до тех пор, пока примесь не будет находиться в центре слоя. Дальнейшее смещение приведет к его уменьшению. Нами были рассмотрены переходы из основного состояния примеси в состояния 1S и 1P подзон РК. Как видно из Рис. 3.11 в случае, когда примесь смещена от начала координат слабо, то интенсивность перехода 1S почти отсутствует. Это объясняется тем, что в случае, когда сферическая симметрия не нарушена, переход 1S запрещен.

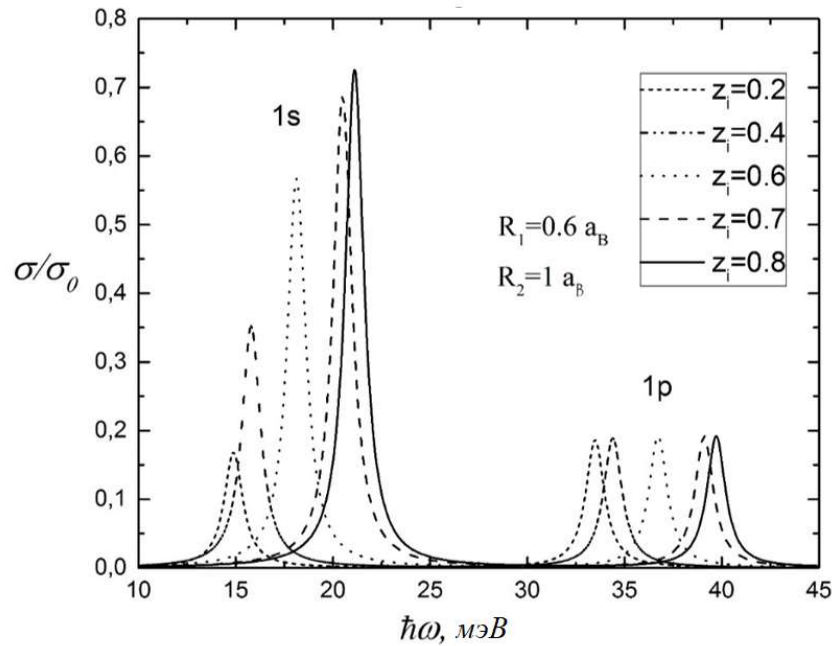


Рис. 3.11(а) Зависимости сечения фотоионизации от энергии падающего фотона для различных значений смещения примеси вдоль оси Z .

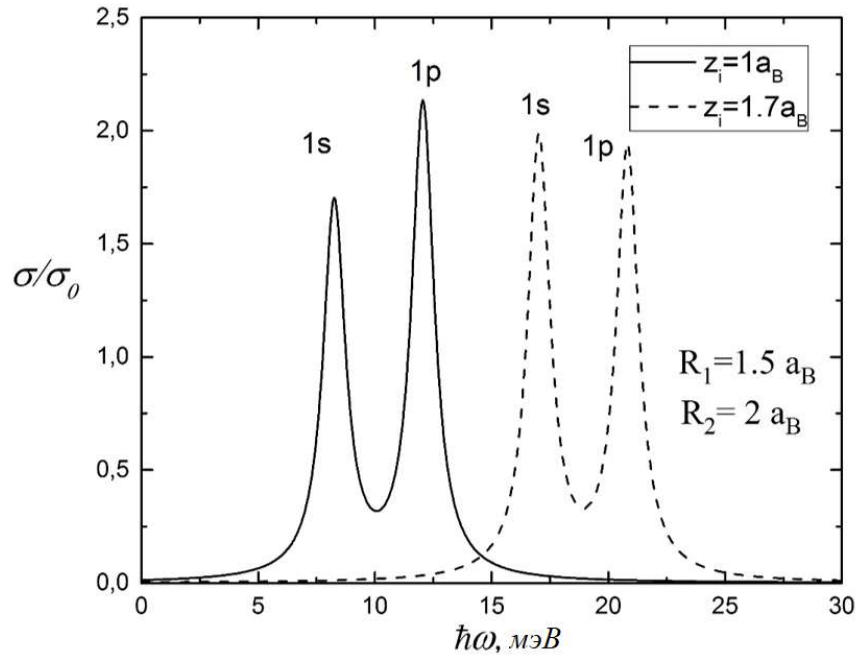


Рис. 3.11(б) Зависимости сечения фотоионизации от энергии падающего фотона для различных значений смещения примеси вдоль оси Z .

3.3.5 Дипольный и квадрупольный моменты сферического слоя со смещенной от центра примесью.

Многие физические характеристики наносистем определяются дипольным и квадрупольным моментами частиц. Нецентральная примесь может нарушить сферическую симметрию и существенно повлиять на распределение электронов и электростатические свойства. Поэтому интересно рассчитать зависимости электростатического дипольного и квадрупольного моментов от положения примеси.

Дипольный момент частицы определяется как [71]:

$$\vec{d} = \int \Psi \vec{r} \Psi dV. \quad (3.56)$$

Зависимости дипольного момента в оси z от положения примеси вдоль той же оси для разных толщин оболочек представлены на Рис. 3.12. Как видно из рисунка, когда примесь находится в области ядра слоя, с увеличением значения положения примеси дипольный момент возрастает линейно. Однако, когда примесь находится в области

оболочки, дипольный момент сначала увеличивается и далее спадает, достигая максимума в центре оболочки.

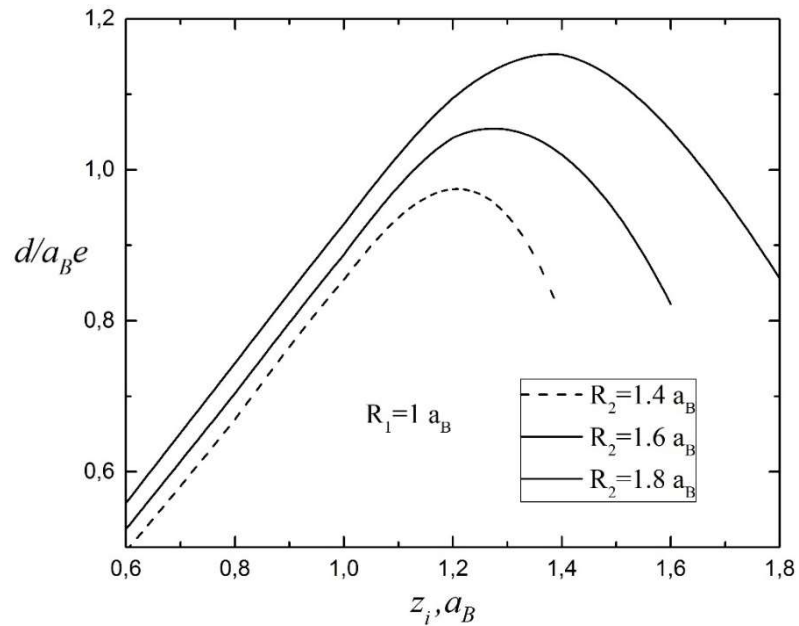


Рис. 3.12 Зависимости дипольного момента в направлении оси z от положения примеси вдоль той же оси для разных толщин оболочек.

Тензор квадрупольного момента электрона определяется как [71]:

$$Q_{ik} = \int \Psi^* \{3ij - \delta_{ij} \bar{r}^2\} \Psi dV, i, j = x, y, z. \quad (3.57)$$

Исходя из сферической симметрии системы, нас будут интересовать только диагональные элементы тензора Q_{ik} . Однако, если примесь смещается вдоль направления z, то согласно симметрии задачи выполняется неравенство $Q_{xx} = Q_{yy} \neq Q_{zz}$. Зависимость квадрупольного момента от положения примеси вдоль оси z показана на Рис. 3.13

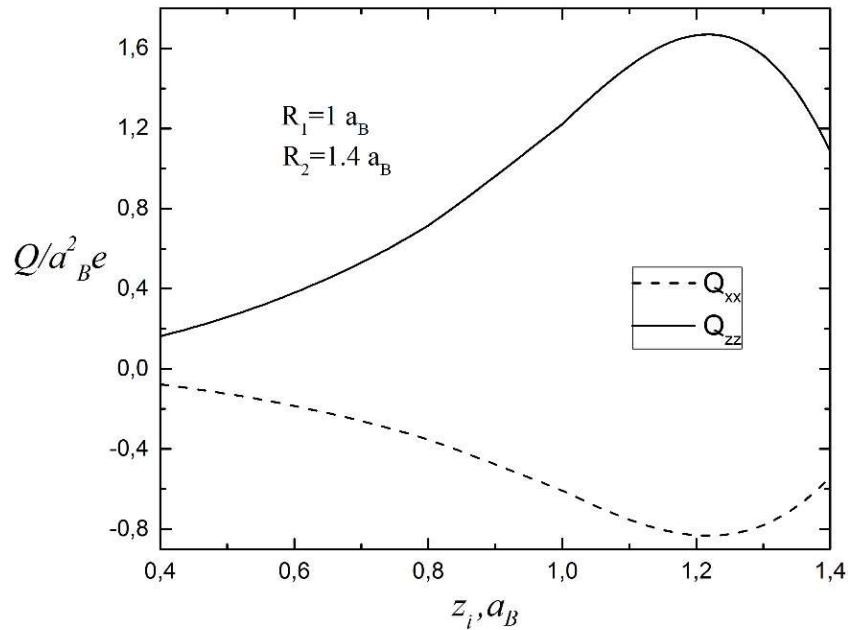


Рис. 3.13. Зависимость квадрупольного момента от положения примеси вдоль оси z . Как следует из данного рисунка вклады Q_{xx} и Q_{zz} имеют противоположные знаки: отрицательный и положительный, соответственно. Заметим также, что поскольку сферическая симметрия нарушена, недиагональные элементы тензора отличны от нуля, однако их значения сравнительно малы (см. Таблицу 3.4).

Q	Q_{xy}	Q_{xz}	Q_{yz}
$z_i = 0.7a_B$	0.0042	-0.0085	-0.0091
$z_i = 1.2a_B$	0.0020	-0.0064	-0.0035

Таблица 3.4 Недиagonalные элементы тензора квадрупольного момента для различного положения примеси. Параметры фиксированы: $R_1 = 1a_B$, $R_2 = 1.4a_B$.

3.4 Экситонные состояния и прямое межзонное поглощение света в ансамбле тороидальных квантовых точек

3.4.1 Электронные состояния

Обычно геометрической моделью квантовых колец выбирался цилиндрический слой. В данном разделе будут рассмотрены электронные состояния в КТ, имеющей форму тороида, более реалистично описывающую реальные квантовые кольца. С геометрической точки зрения для задания тороида имеются два параметра: радиус тороида R и радиус его поперечного сечения r_0 (см. Рис. 3.14).

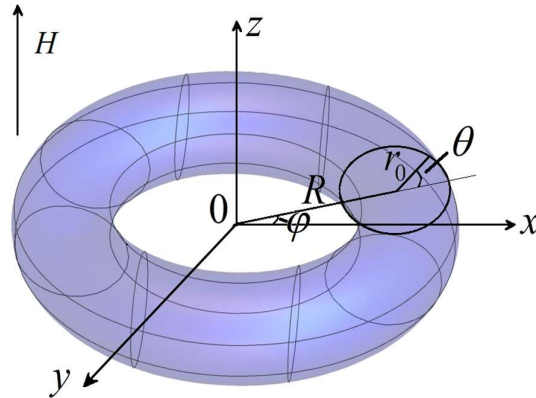


Рис. 3.14. Схематический вид тороидальной КТ.

Рассмотрим движение частицы (электрона, дырки) в тороидальной КТ. Одночастичное уравнение Шредингера в безразмерных величинах можно записать в виде:

$$\hat{H}\Psi(r, \theta, \varphi) = E\Psi(r, \theta, \varphi). \quad (3.58)$$

Здесь $\hat{H} = -\Delta + V_{conf}(\vec{r})$ - Гамильтониан системы, E - энергия системы.

Ограничивающий потенциал КТ определяется выражением:

$$V_{conf}(\vec{r}) = \begin{cases} 0, \vec{r} \in Toroid \\ \infty, \vec{r} \notin Toroid \end{cases} \quad (3.59)$$

Эта задача будет решена в тороидальных координатах. Введем тороидальные координаты (см. Рис. 3.14). Взаимосвязь тороидальных координат $\{r, \theta, \varphi\}$ с декартовыми координатами x, y, z имеют вид:

$$\begin{aligned} x(r, \theta, \varphi) &= (R + r \cos \theta) \cos \varphi \\ y(r, \theta, \varphi) &= (R + r \cos \theta) \sin \varphi \\ z(r, \theta, \varphi) &= r \sin \theta, \end{aligned} \quad (3.60)$$

где $0 < r < \infty$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ - азимутальный угол вокруг направления oZ , $0 \leq \theta \leq 2\pi$ - угол в поперечном сечении.

Для определения ортогональности системы координат следует вычислить метрический тензор $g_{ik} = \left\langle \frac{\partial r}{\partial u_i}, \frac{\partial r}{\partial u_k} \right\rangle$, где u_i , $i = 1, 2, 3$ и r - декартовы координаты, а скобки обозначают скалярное произведение. Так как выбранная в вышеприведённой форме тороидальная система координат ортогональна так как метрический тензор в этом случае не содержит недиагональных элементов и имеет следующий вид:

$$g_{ik} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & (R + r \cos \theta)^2 \end{pmatrix}. \quad (3.61)$$

Элемент объема будет:

$$dV = g^{1/2} dr d\theta d\varphi = r(R + r \cos \theta) dr d\theta d\varphi \quad (3.62)$$

$$g = g_{11}g_{22}g_{33} = r^2 (R + r \cos \theta)^2$$

В ортогональной криволинейной системе координат в общем случае оператор Лапласа может быть представлен как [107]:

$$\Delta = g^{-1/2} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial u_i} \left(\frac{g^{1/2}}{g_{ii}} \frac{\partial}{\partial u_i} \right). \quad (3.63)$$

Таким образом, оператор Лапласа в тороидальных координатах имеет вид:

$$\Delta_{r,\theta,\varphi} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{R + 2r \cos \theta}{r(R + r \cos \theta)} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{(R + r \cos \theta)^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{\sin \theta}{r(R + r \cos \theta)} \frac{\partial}{\partial \theta}. \quad (3.64)$$

Уравнение Шредингера для внутренней области будет записано как:

$$-\Delta_{r,\theta,\varphi} \Phi(r, \theta, \varphi) - k^2 \Phi(r, \theta, \varphi) = 0, \quad k^2 = E, \quad (3.65)$$

где $\Phi(r, \theta, \varphi)$ - волновая функция частицы. Исходя из симметрии проблемы, волновую функцию будем искать в следующем виде:

$$\Phi(r, \theta, \varphi) = \frac{e^{im\varphi} \psi_m(r, \theta)}{\sqrt{R + r \cos \theta}}. \quad (3.66)$$

Подставляя (3.66) в (3.65) для $\psi_m(r, \theta)$, приходим к следующему уравнению:

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{m^2 - 1/4}{(R + r \cos \theta)^2} \right\} \psi_m(r, \theta) - k^2 \psi_m(r, \theta) = 0. \quad (3.67)$$

Нас будут интересовать только КТ с большими радиусами тороида по сравнению с радиусом их поперечного сечения. Это означает, что выполняется условие $R \gg r_0$ и, следовательно, параметр $r/R \ll 1$ намного меньше единицы. Поэтому мы можем

разложить $\frac{m^2 - 1/4}{(R + r \cos \theta)^2}$ в ряд по малому параметру r/R :

$$\frac{m^2 - 1/4}{R^2 \left(1 + \frac{r}{R} \cos \theta\right)^2} = \frac{m^2}{R^2} + H', \quad (3.68)$$

$$H' = -\frac{1}{4R^2} - \frac{2r}{R^3} (m^2 - 1/4) \cos \theta + \frac{3r^2}{R^4} (m^2 - 1/4) \cos^2 \theta. \quad (3.69)$$

Уравнение (3.67) является уравнением типа Гельмгольца. При этом, известно, что уравнение в тороидальных координатах не позволяет разделение переменных [107]. Однако, так как $r/R \ll 1$ H' является достаточно малым, что позволяет применить метод теории возмущений для решения двумерной задачи. Полный гамильтониан двумерной задачи можно записать в виде:

$$H_{2D} = H_0 + H', \quad (3.70)$$

$$H_0 = -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{m^2}{R^2}. \quad (3.71)$$

Рассмотрим сначала невозмущенную систему. Заметим, что гамильтониан невозмущенной системы теперь разделяется:

$$H_0 \psi_0 = E_0 \psi_0. \quad (3.72)$$

Невозмущенную волновую функцию можно представить в виде $\psi_0 = f(r) e^{it\theta}$, где $t = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ - квантовое число в направлении θ . Подставляя его в уравнение Шредингера, получим:

$$-\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{t^2}{r^2} f - k_0^2 f = 0, \quad k_0^2 = E_0 - \frac{m^2}{R^2}. \quad (3.73)$$

Радиальное уравнение имеет следующее решение:

$$f(r) = C_1 J_t(k_0 r) + C_2 Y_t(k_0 r). \quad (3.74)$$

Исходя из граничных условий $f(r_0) = 0$, $f(0) = C$, вторая константа должна быть равна нулю $C_2 = 0$. Кроме того, используя граничные условия, можно определить энергетический спектр:

$$k_{0,n_r} = \frac{\lambda_{t,n_r}}{r_0}, \quad (3.75)$$

где λ_{t,n_r} - нули функции Бесселя первого рода $J_t(r)$, $n_r = 1, 2, \dots$ - радиальное квантовое число. Наконец, для энергетического спектра и нормированной волновой функции невозмущенной задачи имеем соответственно:

$$E_0 = \left(\frac{\lambda_{t,n_r}}{r_0} \right)^2 + \frac{m^2}{R^2}. \quad (3.76)$$

$$\psi(r, \theta) = \frac{1}{r_0 \sqrt{\pi} J_{|t|+1}(\lambda_{t,n_r})} J_t\left(\frac{\lambda_{t,n_r}}{r_0} r\right) e^{it\theta}. \quad (3.77)$$

Вычислим матричные элементы оператора возмущения (3.69):

$$\langle n_{r_1} t_1 | H' | n_{r_2} t_2 \rangle = \int_0^{r_{\max}} \int_{-\pi}^{\pi} \psi_{0n_{r_1} t_1}^*(r, \theta) H' \psi_{0n_{r_2} t_2}(r, \theta) r d\theta d\varphi. \quad (3.78)$$

Этот интеграл разбивается на три части $\langle n_{r_1} t_1 | H' | n_{r_2} t_2 \rangle = I_1 + I_2 + I_3$. Для недиагональных элементов все три интеграла равны нулю, а для диагональных матричных элементов имеем:

$$I_1 = -\frac{1}{4R^2}, I_2 = 0, I_3 = \frac{3r_{\max}^2}{R^4} (m^2 - 1/4) I_0, \quad (3.79)$$

где

$$I_0 = \frac{2^{-2t-1} \lambda_{t,n_r}^{2t} F\left(\left\{\frac{1}{2} + t, \frac{5}{2} + t\right\}, \left\{1 + t, \frac{7}{2} + t, 1 + 2t\right\}, -\lambda_{t,n_r}^2\right)}{(5 + 2t) |J_{1+t}(\lambda_{t,n_r})|^2 \Gamma(1+t)^2}. \quad (3.80)$$

Здесь F - обобщенная гипергеометрическая функция. Наконец, для энергии системы с учетом вычисленной поправки получим:

$$E_{n_r, t, m} = E_0 + \langle n_r t | H' | n_r t \rangle = \left(\frac{\lambda_{t,n_r}}{r_{\max}} \right)^2 + \frac{m^2 - 1/4}{R^2} + \frac{3r_{\max}^2}{R^4} (m^2 - 1/4) I_0. \quad (3.81)$$

Отметим, что аналогичный расчет был выполнен с помощью метода конечных элементов (МКЭ), а сравнение значений энергии показано в таблице 3.5.

R	m = 0		m = 1		m = 2	
	МКЭ	Расч.	МКЭ	Расч.	МКЭ	Расч.
2	5.747	5.783	6.018	6.033	6.827	6.783
3	5.800	5.783	5.918	5.894	6.260	6.227
4	5.823	5.783	5.884	5.845	6.076	6.033
5	5.838	5.783	5.875	5.823	5.999	5.943

Таблица 3.5. Сравнение значений энергии, рассчитанных по формуле (3.81) и МКЭ, примененного к тороидальной КТ. Радиус поперечного сечения фиксирован $r_0 = 1$.

Далее рассмотрим воздействие магнитного поля на электронные состояния. Пусть теперь система находится в однородном магнитном поле \vec{H} , направленном в направлении z . Векторный потенциал в декартовых координатах имеет вид:

$$\vec{A} = \{A_x = -yH/2, A_y = xH/2, A_z = 0\}. \quad (3.82)$$

Магнитную часть гамильтониана можно записать в декартовых координатах следующим образом:

$$V_{mag}(\vec{r}) = -i\gamma H \left(-y \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial y} \right) + \frac{\gamma^2}{4} H^2 (x^2 + y^2), \quad (3.83)$$

где параметр $\gamma = \frac{\hbar\omega_H}{2E_R} = \frac{ea_B^2}{\hbar c} H$, $\omega_H = \frac{eH}{\mu c}$, $\gamma = 0.1577(T^{-1}) \cdot H(T)$ для GaAs. Запишем это

выражение также в тороидальных координатах:

$$V_{mag}(\vec{r}) = -i\gamma H \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} \right) + \frac{\gamma^2}{4} H^2 (R + r \cos \theta)^2. \quad (3.84)$$

Подставляя волновую функцию в виде (3.66) в уравнение Шредингера, включающего оператор магнитного поля, получим:

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{m^2 - 1/4}{(R + r \cos \theta)^2} + m\gamma + \gamma^2 \left(\frac{r^2}{8} + \frac{R^2}{4} + \frac{1}{2} rR \cos \theta + \frac{1}{8} r^2 \cos \theta \right) \right\} \psi_m(r, \theta) - k^2 \psi_m(r, \theta) = 0. \quad (3.85)$$

Это уравнение отличается от (3.67) тем, что оно имеет дополнительные члены, пропорциональные значению магнитного поля и его квадрату. Уравнение (3.85) будет решаться численно, используя метод конечных элементов. Зависимость энергетических спектров от магнитного поля показана на Рис. 3.15, где кривые представляют собой энергетическую зависимость от напряженности магнитного поля для различных уровней энергии (уровни пронумерованы в порядке возрастания).

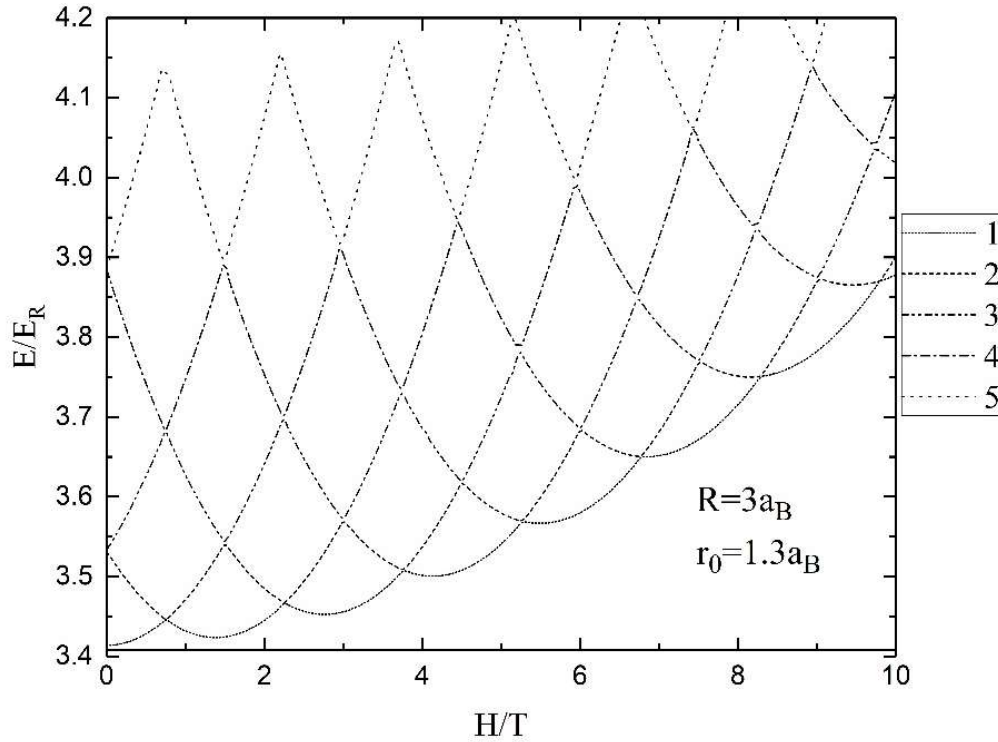


Рис. 3.15 Зависимость уровней энергии от напряженности магнитного поля.

Как видно из Рис. 3.15, имеют место осцилляции Ааронова-Бома для энергетических уровней тороидальной КТ. Такой эффект обсуждается в работе [108], где собраны экспериментальные данные и получено изменение наклона кривой зависимости энергии электрона от магнитного поля. Это изменение наклона было идентифицировано как индуцированный магнитным полем переход из состояния $m = 0$ в $m = -1$.

Примечательным является тот факт, что в квантовых кольцах с геометрическими искажениями, рассмотренными в [109,110], имеет место эффект антипересечения из-за нарушения азимутальной симметрии. Так в [111] изучены эффекты появления

антипересечения в осцилляциях Ааронова-Бома из-за перехода от круговой к эллиптической геометрии кольца.

3.4.2 Оптическое поглощение

Рассмотрим ансамбль тороидальных КТ с дисперсией их размеров. Обратим внимание, что дисперсия по геометрическим параметрам приведет к уширению спектральных линий. Основной механизм уширения обусловлен дисперсией радиуса поперечного сечения тороида, поэтому будем пренебрегать дисперсией внешнего радиуса R . Здесь переменная u в выражении распределения Лифшица – Слезова представляет собой отношение радиуса поперечного сечения к его среднему значению $u = r_0 / \overline{r_0} \cdot \overline{r_0}$ - среднее значение радиуса поперечного сечения тороида.

Перейдем к обсуждению промежуточного режима РК, где необходимо учитывать взаимодействие между электроном и дыркой. Мы рассмотрим эту проблему в рамках адиабатического приближения, основываясь на том факте, что $\mu_e \ll \mu_h$. Это означает, что быстро движущийся электрон не «ощущает» присутствия тяжелой дырки. Дырка «движется» в эффективном потенциале, создаваемом электроном. Кроме того, мы будем использовать азимутальную симметрию волновой функции электрона в основном состоянии. Эффективный потенциал, действующий на дырку, имеет следующий вид [66]:

$$V_{0,0,0}(\vec{r}_h) = -2 \int \frac{|\Phi(\vec{r}_e)|^2}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} d^3 \vec{r}_e. \quad (3.86)$$

Используя выражение для элемента объема и волновой функции в основном состоянии, получим:

$$V_{0,0,0}(\vec{r}_h) = -2 \int \frac{|\psi_m(r, \theta)|^2}{r_{12}} r dr d\theta d\varphi, \quad (3.87)$$

где

$$r_{12} = \left\{ r^2 + 2R^2 + r_h^2 + 2r \cos \theta (R - (R + r_h \cos \theta_h) \cos(\varphi - \varphi_h)) - 2(-Rr_h \cos \theta_h + R(R + r_h \cos \theta_h) \cos(\varphi - \varphi_h) + rr_h \sin \theta \sin \theta_h) \right\}^{1/2} \quad (3.88)$$

- расстояние между частицами. Численная оценка интеграла (3.87) показывает, что зависимость от φ_h и θ_h слабая и мы можем ими пренебречь. Поэтому радиальная зависимость эффективного потенциала может быть представлена в следующем виде:

$$V_{0,0,0}(r_h) = \alpha + \beta r_h^2, \quad (3.89)$$

где α, β - коэффициенты, которые определяются путем численного интегрирования. Имея этот потенциал, можем вычислить энергетический спектр дырок и их волновые функции.

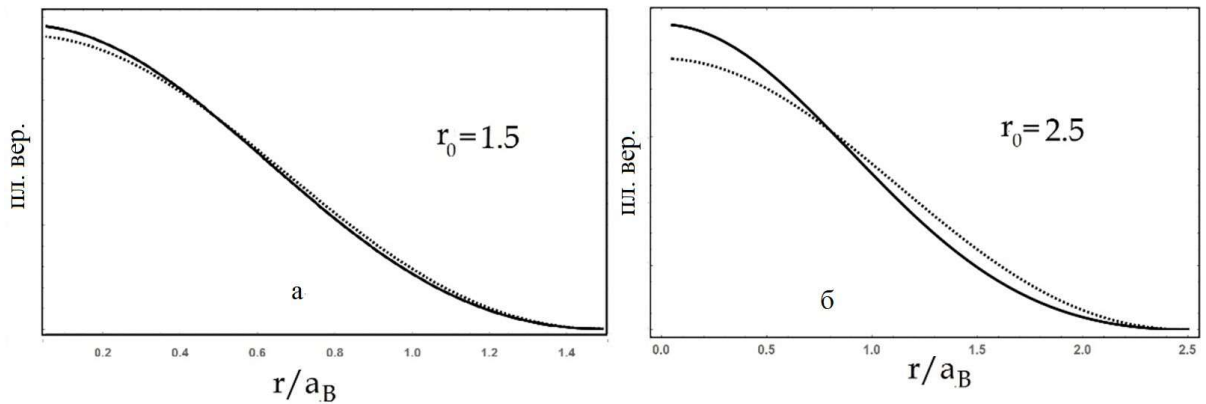


Рис. 3.16. Радиальная плотность вероятности электрона (пунктирная линия) и дырки (сплошная линия) при разных значениях радиуса поперечного сечения. При $r_0 = 1.5$ (а) и $r_0 = 2.5$ (б).

Из этого рисунка видно, что для случая (а) выполняется режим сильного РК, поэтому радиальные волновые функции электрона и дырки сильно перекрываются. Это связано с тем, что эффект взаимодействия электрона и дырки для первого случая значительно меньше эффекта РК, чем во втором случае. В промежуточном режиме квантования энергии электрона и дырки зависят от отношения их эффективных масс. Для учета взаимодействия электрона и дырки важно рассчитать значение силы осциллятора.

Очевидно, что в режиме сильного РК этот интеграл равен единице, поскольку волновые функции ортогональны, где f_0 - сила осциллятора объемного материала. Для промежуточного режима РК с учетом правил отбора для силы осциллятора можно записать:

r_0	$f_{v,v}/f_0$
1.5	0.95
2	0.74
2.5	0.62
3	0.53

Таблица 3.6 Зависимость силы осциллятора от радиуса поперечного сечения тороида r_0 . Радиус тороида фиксирован $R = 4a_B$.

Как видно из таблицы, с ростом радиуса поперечного сечения ослабевает эффект РК и перекрытие волновых функций электрона и дырки уменьшается.

3.5 Тепловые и магнитные свойства электронного газа в тороидальной квантовой точке

Перейдем к изучению статистических свойств слабо взаимодействующего электронного газа, локализованного в тороидальных КТ. Для вычисления термодинамических свойств системы необходимо вычислить ее статистическую сумму. Статистическая сумма может быть вычислена путем прямого суммирования по всем возможным энергетическим состояниям. Предполагая, что электронный газ подчиняется бoльцмановской статистике, статистическую сумму можно записать следующим образом [94-98]:

$$Z = \sum_v \exp(-\beta E_v), \quad (3.90)$$

где $\beta = 1/kT$ - обратная температура, v - множество квантовых чисел. Сумма в выражении (3.90) вычисляется численно. С помощью выражения для статистической суммы можно рассчитать термодинамические и магнитные параметры исследуемой системы. Для средней и свободной энергии имеем:

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta}, \quad \langle F \rangle = -\frac{1}{\beta} \ln(Z). \quad (3.91)$$

Следовательно, для намагниченности и магнитной восприимчивости имеем:

$$\langle M \rangle = \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial H}, \quad (3.92)$$

$$\langle \chi \rangle = \frac{\partial M}{\partial H}. \quad (3.93)$$

Средняя теплоемкость и энтропия также могут быть вычислены с использованием статистической суммы:

$$\langle C_v \rangle = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}, \quad (3.94)$$

$$\langle S \rangle = \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{\beta} \ln(Z). \quad (3.95)$$

Ниже приводятся результаты численных расчетов для структуры GaAs. Все кривые были рассчитаны с учетом 30 уровней энергии, так как зависимость статистической суммы от количества энергетических уровней носит насыщающий характер. Эта зависимость показана в таблице 3.7.

N	$Z, T = 300K$	$Z, T = 77K$
10	0.0176	0.0180
20	1.777	0.0181
30	1.885	0.0181
40	1.910	0.0181
50	1.912	0.0181

Таблица 3.7 Зависимость статистической суммы от числа N учитываемых уровней энергии.

Как следует из таблицы, оптимальное количество уровней, принимаемых во внимание, составляет около 30, потому что значения статистической суммы меняются слишком медленно после этого значения.

Средняя зависимость энергии от температуры и напряженности магнитного поля представлена на Рис. 3.17.

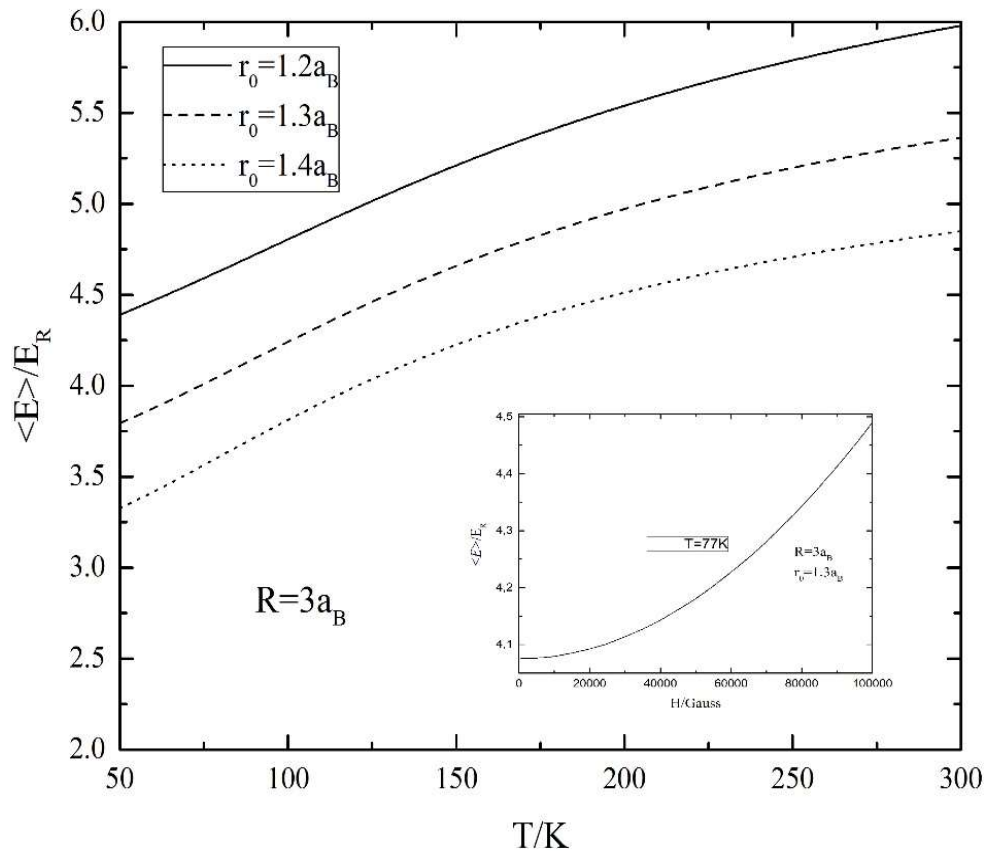


Рис. 3.17. Зависимость средней энергии от температуры и от радиуса поперечного сечения. Зависимость средней энергии от напряженности магнитного поля (вставка).

На Рис. 3.17 показано, что средняя энергия монотонно возрастает с увеличением температуры. В области малых температур наблюдается линейная зависимость от температуры, однако для более высоких температур отклонение от линейного характера становится значительным. Кроме того, увеличение радиуса поперечного сечения приводит к уменьшению средней энергии. Это связано с эффектом РК. При малом значении радиусов поперечного сечения влияние стенок КТ сильнее, чем в случае больших радиусов. Зависимость средней энергии от напряженности магнитного поля также носит монотонный характер. Среднее значение энергии увеличивается с увеличением напряженности магнитного поля (см. вставка Рис. 3.17).

Зависимость теплоемкости от температуры показана на Рис. 3.18.

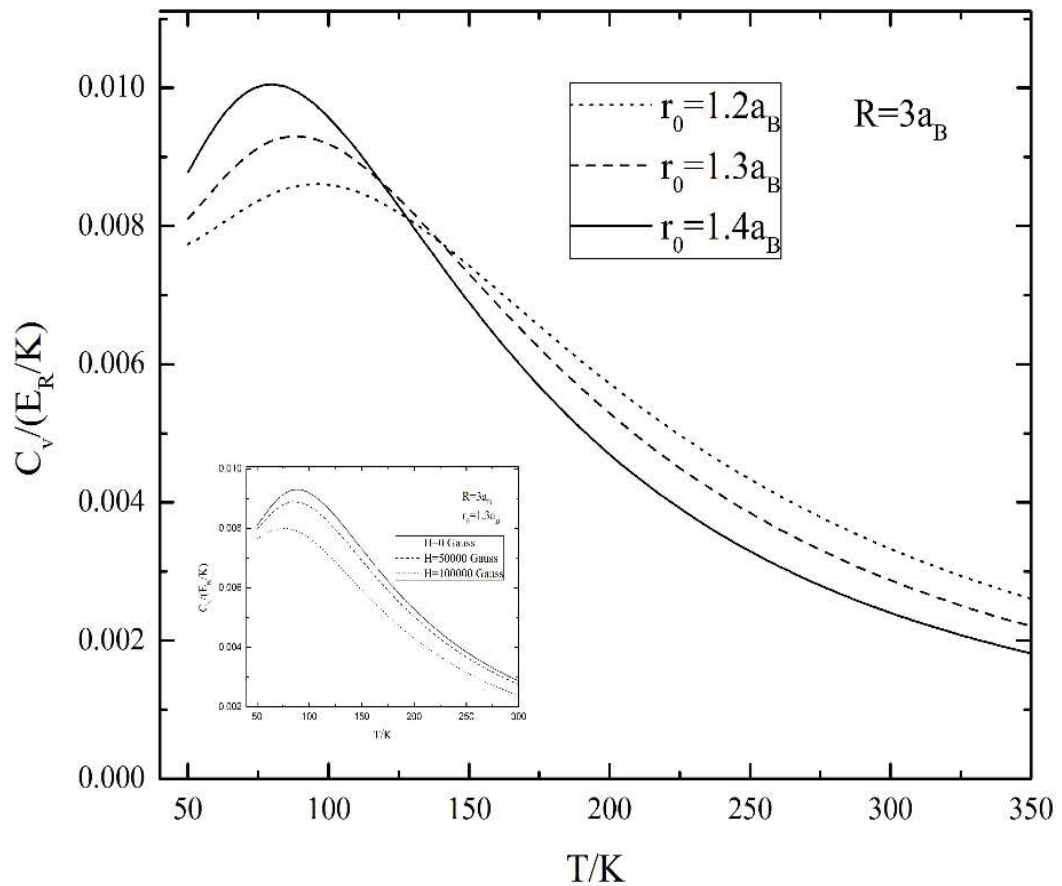


Рис. 3.18. Зависимость теплоемкости от температуры для разных значений радиуса поперечного сечения. Зависимость теплоемкости от температуры для различной напряженности магнитного поля (вставка).

Как следует из Рис. 3.18, с увеличением температуры удельная теплоемкость возрастает до достижения максимума, а затем спадает. Увеличение радиуса поперечного сечения также приводит к увеличению высоты пиков зависимости теплоемкости, а ширина пика становится более узкой. Это связано с тем, что при повышении температуры изменяется вероятность заполнения уровней, а, следовательно, и средняя энергия монотонно возрастает (см. Рис. 3.18). Также, следует упомянуть, что аналогичное поведение наблюдалось в [99]. Кроме того, из вставки видно, что с ростом магнитного поля ширина кривых теплоемкости увеличивается, а высота уменьшается.

На Рис. 3.19 показана зависимость энтропии от температуры при различных значениях магнитного поля.

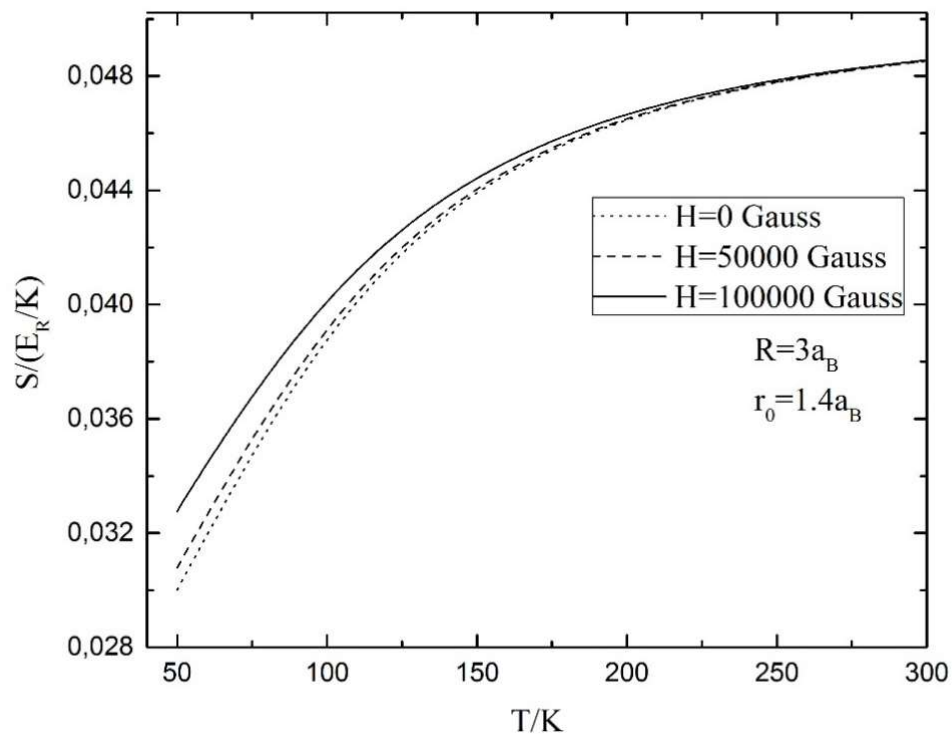


Рис. 3.19. Зависимость энтропии от температуры при разных значениях магнитного поля.

Как видно из рисунка, энтропия монотонно возрастает с повышением температуры. Это связано с уменьшением вероятности заполнения уровней с повышением температуры и, следовательно, с увеличением беспорядка в системе. При фиксированной температуре энтропия уменьшается с увеличением магнитного поля из-за упорядочивания системы путем роста магнитного квантования.

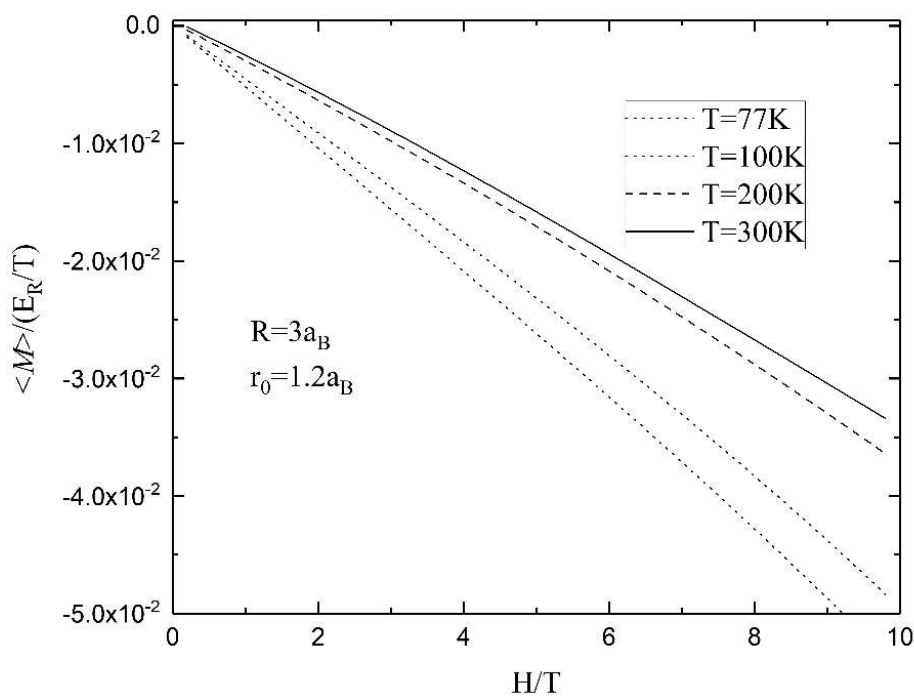


Рис. 3.20. Зависимость намагниченности от напряженности магнитного поля при разных значениях температуры.

На рисунках 3.20 и 3.21 показаны магнитные свойства структуры. На Рис. 3.20 показана зависимость намагниченности от напряженности магнитного поля. Намагниченность уменьшается почти линейно с увеличением магнитного поля. Аналогичные зависимости получены в [99]. Увеличивая температуру, угол наклона кривой уменьшается. На Рис. 3.21 показана зависимость магнитной восприимчивости от напряженности магнитного поля при разных температурах.

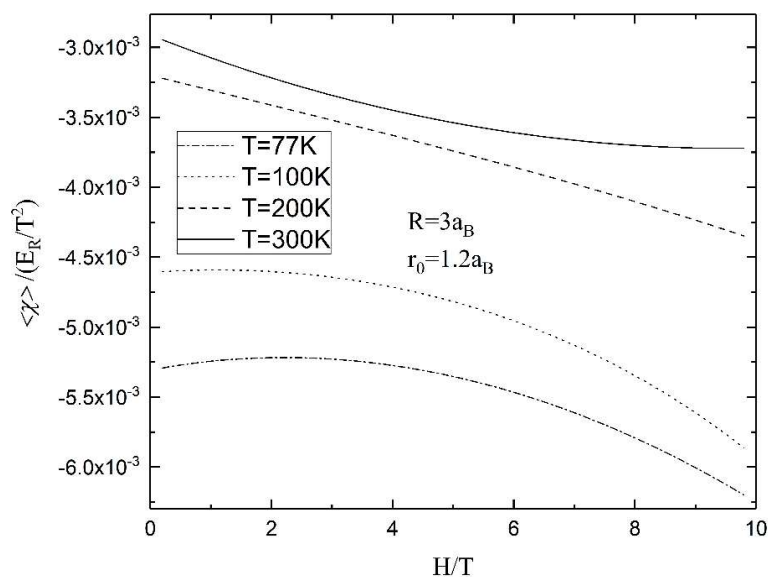


Рис. 3.21. Зависимость магнитной восприимчивости от напряженности магнитного поля при разных температурах.

Как видно из рисунка, кривые имеют экстремум. При увеличении температуры кривая зависимости магнитной восприимчивости от магнитного поля меняет свой наклон. Для более высоких температур кривая сначала уменьшается до минимальной точки и возрастает при сильных полях. Для более низких температур кривая сначала увеличивается и после достижения максимальной точки уменьшается.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В заключение представим основные результаты и выводы предлагаемой диссертационной работы:

1. Рассмотрена задача двух электронов в сферической КТ с параболическим потенциалом ограничения как в случае отсутствия, так и присутствия примесного центра. Исследован энергетический спектр таких структур, а также проведена оценка на основании соотношений неопределенности Гейзенберга. Учитывая спины электронов, был рассчитан обменный интеграл, а также зависимости времени обмена состояниями от радиуса КТ. Показано, что в случае отсутствия примеси зависимость времени обмена состояниями между электронами от радиуса КТ носит линейный характер. Выявлен насыщающий характер зависимости времени обмена состояниями от радиуса КТ в случае наличия примеси.
2. Исследована специфика энергетического спектра электронов в КШ в форме параллелепипеда. Было найдено семейство трижды вырожденных энергетических уровней, характеризующихся модулярной группой $\Gamma(2)$. Кроме того, было обнаружено, что в основе каждого семейства трижды вырожденных уровней лежат пифагоровы тройки. Также были исследованы межзонные оптические переходы в ансамбле тонких КШ, и было показано, что с учетом правил отбора для электронных переходов можно «визуализировать» пифагоровы тройки.
3. Получены зависимости коэффициента межзонного поглощения и интенсивности фотолюминесценции от энергии падающего фотона в режимах сильного и промежуточного РК для сферической КТ ядро/оболочка/оболочка с потенциалом ограничения Винтерница-Смординского. В рамках вариационного метода был рассмотрен квантовый сферический слой со смещенной от центра примесью. Получены зависимости спектров фотоионизации от положения примеси и размеров КТ.
4. Получены зависимости энергии электрона в КТ, имеющей форму тороида, от её размеров, а также от величины магнитного поля. Также были получены зависимости коэффициента поглощения от энергии фотона. Рассмотрены термодинамические и магнитные свойства слабо взаимодействующего электронного газа в КТ, имеющей

форму тороида. Получены зависимости средней энергии, теплоемкости и энтропии слабо взаимодействующего электронного газа от температуры, а также намагниченности и магнитной восприимчивости от напряженности магнитного поля.

ДОПОЛНЕНИЕ

Расчет обменного интеграла электронов в параболической КТ

Рассмотрим обменный интеграл в случае, то есть, когда первый электрон находится в состоянии $|n_1, l_1, m_1\rangle$, второй в $|n_2, l_2, m_2\rangle$. Волновая функция электрона в сферической параболической КТ представляет собой:

$$\Psi_{|n,l,m\rangle} = C_{nl} R_{n,l}(\rho) Y_{lm}(\theta, \varphi), \text{ где } R_{n,l}(\rho) = \exp\left(-\frac{\rho^2}{2}\right) \rho^l F_1\left(-n, l + \frac{3}{2}, \rho^2\right), \quad (\text{Д.1})$$

где C_{nl} - нормировочный коэффициент. В сферических координатах имеем:

$$A = \frac{e^2}{\varepsilon a_B} |C_{n_1, l_1}|^2 |C_{n_2, l_2}|^2 \int R_{n_1, l_1}^*(\rho_1) Y_{l_1, m_1}^*(\theta_1, \varphi_1) R_{n_2, l_2}^*(\rho_2) \cdot Y_{l_2, m_2}^*(\theta_2, \varphi_2) \frac{1}{\rho_{12}} \cdot R_{n_1, l_1}(\rho_2) Y_{l_1, m_1}(\theta_2, \varphi_2) \cdot R_{n_2, l_2}(\rho_1) Y_{l_2, m_2}(\theta_1, \varphi_1) \cdot \rho_1^2 \rho_2^2 d\Omega_1 d\Omega_2 d\rho_1 d\rho_2 \quad (\text{Д.2})$$

Используем известное разложение кулоновского потенциала по сферическим функциям [55]:

$$\frac{1}{\rho_{12}} = \begin{cases} \frac{4\pi}{\rho_1} \sum_{l,m} \frac{1}{(2l+1)} \left(\frac{\rho_2}{\rho_1}\right)^l Y_{l,m}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{l,m}(\theta_2, \varphi_2), \rho_1 > \rho_2 \\ \frac{4\pi}{\rho_2} \sum_{l,m} \frac{1}{(2l+1)} \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right)^l Y_{l,m}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{l,m}(\theta_2, \varphi_2), \rho_2 > \rho_1 \end{cases} \quad (\text{Д.3})$$

Подставляя данное разложение в (Д.2) получим:

$$A = \frac{e^2}{\varepsilon a_B} |C_{n_1, l_1}|^2 |C_{n_2, l_2}|^2 \int R_{n_1, l_1}^*(\rho_1) R_{n_2, l_2}^*(\rho_2) R_{n_1, l_1}(\rho_2) R_{n_2, l_2}(\rho_1) \rho_1^2 \rho_2^2 \cdot Y_{l_1, m_1}^*(\theta_1, \varphi_1) \cdot Y_{l_2, m_2}^*(\theta_2, \varphi_2) Y_{l_1, m_1}(\theta_2, \varphi_2) Y_{l_2, m_2}(\theta_1, \varphi_1) \frac{1}{\rho_{12}} \cdot d\Omega_1 d\Omega_2 d\rho_1 d\rho_2 = \quad (\text{Д.4}) \\ = \frac{e^2}{\varepsilon a_B} |C_{n_1, l_1}|^2 |C_{n_2, l_2}|^2 \int R(\rho_1, \rho_2) \text{Angl}(\rho_1, \rho_2) d\rho_1 d\rho_2,$$

где $R(\rho_1, \rho_2) = R_{n_1, l_1}^*(\rho_1) R_{n_2, l_2}^*(\rho_2) R_{n_1, l_1}(\rho_2) R_{n_2, l_2}(\rho_1) \frac{1}{\rho_{12}} \rho_1^2 \rho_2^2$, $\text{Angl}(\rho_1, \rho_2)$ обозначение

углового интеграла. Используя следующее выражение:

$$\iint Y_{l_1, m_1}(\theta, \varphi) Y_{l_2, m_2}(\theta, \varphi) Y_{l_3, m_3}(\theta, \varphi) d\Omega = \frac{\sqrt{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1)}}{\sqrt{4\pi}} \cdot \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}, \quad (\text{Д.5})$$

где $\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ -3j-символ Вигнера, и заметив, что, 3j-символ Вигнера отличен от нуля при выполнении определенных условий, например, $m_1 + m_2 + m_3 = 0$, из всей суммы по m остается один член $m = 0$. Учитывая условие для 3j-символов Вигнера $|l_1 - l_2| \leq l \leq l_1 + l_2$, получим:

$$Angl(\rho_1, \rho_2) = \begin{cases} Angl_1(\rho_1, \rho_2), \rho_1 > \rho_2 \\ Angl_2(\rho_1, \rho_2), \rho_2 > \rho_1 \end{cases}, \quad (Д.6)$$

где

$$Angl_1(\rho_1, \rho_2) = \frac{(-1)^{m_1+m_2} (2l_1+1)(2l_2+1)}{\rho_1} \sum_{|l_1-l_2| \leq l \leq l_1+l_2} \left(\frac{\rho_2}{\rho_1}\right)^l \cdot \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l \\ -m_1 & m_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l \\ m_1 - m_2 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$Angl_2(\rho_1, \rho_2) = \frac{1}{\rho_2} (-1)^{m_1+m_2} (2l_1+1)(2l_2+1) \sum_{|l_1-l_2| \leq l \leq l_1+l_2} \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right)^l \cdot \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l \\ -m_1 & m_2 & m_2 - m_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l \\ m_1 - m_2 & m_2 - m_1 & 0 \end{pmatrix}$$

.

Тогда окончательно для обменного интеграла:

$$A = \frac{e^2}{a_B} \left| C_{n_1, l_1} \right|^2 \left| C_{n_2, l_2} \right|^2 \int_0^\infty \left\{ \int_0^{\rho_1} R(\rho_1, \rho_2) \cdot Angl_1(\rho_1, \rho_2) d\rho_2 + \int_{\rho_1}^\infty R(\rho_1, \rho_2) \cdot Angl_2(\rho_1, \rho_2) d\rho_2 \right\} d\rho_1. \quad (Д.7)$$

Расчет кулоновского интеграла электронов в параболической КТ

Проводя выкладки, аналогичные предыдущему, мы можем рассчитать также и кулоновский интеграл.

$$C = k \int_0^\infty \left\{ \int_0^{\rho_1} R(\rho_1, \rho_2) \cdot Angl_1(\rho_1, \rho_2) d\rho_2 + \int_{\rho_1}^\infty R(\rho_1, \rho_2) \cdot Angl_2(\rho_1, \rho_2) d\rho_2 \right\} d\rho_1, \quad (Д.8)$$

где $R(\rho_1, \rho_2) = e^{-\rho_1^2} e^{-\rho_2^2} \cdot \rho_1^{2l_1+2} \cdot \rho_2^{2l_2+2} \left[{}_1F_1\left(-n_1, l_2 + \frac{3}{2}, \rho_1^2\right) {}_1F_1\left(-n_2, l_2 + \frac{3}{2}, \rho_2^2\right) \right]^2$,

$$Angl_1(\rho_1, \rho_2) = \frac{1}{\rho_1} (-1)^{m_1+m_2} (2l_1+1)(2l_2+1) \sum_{0 \leq l \leq 2l_1} \left(\frac{\rho_2}{\rho_1}\right)^l \cdot \begin{pmatrix} l_1 & l_1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & l_2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_1 & l \\ -m_1 & m_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & l_2 & l \\ -m_2 & m_2 & 0 \end{pmatrix}$$

,

$$Angl_2(\rho_1, \rho_2) = \frac{1}{\rho_2} (-1)^{m_1+m_2} (2l_1+1)(2l_2+1) \sum_{0 \leq l \leq 2l_1} \left(\frac{\rho_1}{\rho_2} \right)^l \cdot \begin{pmatrix} l_1 & l_1 & l \\ 000 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & l_2 & l \\ 000 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_1 & l \\ -m_1 & m_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & l_2 & l \\ -m_2 & m_2 & 0 \end{pmatrix}$$

Расчет интеграла, входящего в поправку энергии основного состояния в параболической КТ

Интеграл, входящий в выражение для поправки энергии, может быть записан как:

$$J = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\pi e^{-\rho_1^2 - \rho_2^2} \rho_1^2 \rho_2^2 \text{Sin}\theta_2 \frac{\text{Sin}\theta_1}{\sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2\text{Cos}\theta_1}} d\rho_1 d\rho_2 d\theta_1 d\theta_2 d\varphi_1 d\varphi_2 = \quad (\text{Д.9})$$

$$= \int_0^\infty d\rho_1 \int_0^\infty d\rho_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \int_0^\pi d\theta_2 \cdot e^{-\rho_1^2 - \rho_2^2} \rho_1^2 \rho_2^2 \text{Sin}\theta_2 \int_0^\pi \frac{\text{Sin}\theta_1}{\sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2\text{Cos}\theta_1}} d\theta_1.$$

Используя известное соотношение [55]:

$$\int_0^\pi \frac{\text{Sin}\theta_1}{\sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2\text{Cos}\theta_1}} d\theta_1 = \begin{cases} \frac{2}{\rho_2}, & \rho_2 > \rho_1 \\ \frac{2}{\rho_1}, & \rho_2 < \rho_1 \end{cases} \equiv f(\rho_1, \rho_2) \quad (\text{Д.10})$$

Тогда для интеграла (Д.9) получим:

$$J = \int_0^\infty d\rho_1 \int_0^\infty d\rho_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 e^{-\rho_1^2 - \rho_2^2} \rho_1^2 \rho_2^2 f(\rho_1, \rho_2) \int_0^\pi d\theta_2 \text{Sin}\theta_2 = \quad (\text{Д.11})$$

$$2 \int_0^\infty d\rho_1 \int_0^\infty d\rho_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 e^{-\rho_1^2 - \rho_2^2} \rho_1^2 \rho_2^2 f(\rho_1, \rho_2) d\varphi_2$$

Так как $\int_0^\pi d\theta_2 \text{Sin}\theta_2 = -\text{Cos}\theta_2|_0^\pi = 2$ интегрирование по φ_1 и φ_2 приводит к умножению на

$4\pi^2$, таким образом получаем:

$$J = 8\pi^2 \int_0^\infty d\rho_1 \int_0^\infty d\rho_2 e^{-\rho_1^2 - \rho_2^2} \rho_1^2 \rho_2^2 f(\rho_1, \rho_2) d\rho_2 = \quad (\text{Д.12})$$

$$= 8\pi^2 \int_0^\infty d\rho_1 \left\{ \int_0^{\rho_1} e^{-\rho_1^2 - \rho_2^2} \rho_1^2 \rho_2^2 \frac{2}{\rho_1} d\rho_2 + \int_{\rho_1}^\infty e^{-\rho_1^2 - \rho_2^2} \rho_1^2 \rho_2^2 \frac{2}{\rho_2} d\rho_2 \right\} =$$

$$= 8\pi^2 \int_0^\infty d\rho_1 \left\{ 2\rho_1 e^{-\rho_1^2} J_1 + 2e^{-\rho_1^2} \rho_1^2 J_2 \right\}.$$

Проинтегрировав по частям и введя функцию ошибок $erf(\rho_1) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\rho_1} e^{-\rho_2^2} d\rho_2$ для J_1

$$J_1 = -\frac{1}{2} \left\{ \rho_2 e^{-\rho_2^2} \Big|_0^{\rho_1} - \int_0^{\rho_1} e^{-\rho_2^2} d\rho_2 \right\} = -\frac{1}{2} \rho_1 e^{-\rho_1^2} + \frac{\sqrt{\pi}}{4} \frac{1}{2} \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\rho_1} e^{-\rho_2^2} d\rho_2 = -\frac{1}{2} \rho_1 e^{-\rho_1^2} + \frac{\sqrt{\pi}}{4} erf(\rho_1). \quad (\text{Д.13})$$

Рассмотрим второй интеграл J_2 :

$$J_2 = \int_{\rho_1}^{\infty} e^{-\rho_2^2} \rho_2 d\rho_2 = -\frac{1}{2} \int_{\rho_1}^{\infty} e^{-\rho_2^2} d(-\rho_2^2) = -\frac{1}{2} e^{-\rho_2^2} \Big|_{\rho_1}^{\infty} = \frac{1}{2} e^{-\rho_1^2} \quad (\text{Д.14})$$

Тогда получим:

$$\begin{aligned} J &= 8\pi^2 \int_0^{\infty} d\rho_1 \left\{ -\rho_1^2 e^{-\rho_1^2} e^{-\rho_1^2} + e^{-\rho_1^2} \rho_1 \frac{\sqrt{\pi}}{2} erf(\rho_1) + \rho_1^2 e^{-\rho_1^2} e^{-\rho_1^2} \right\} = \\ &= 4\pi^{5/2} \int_0^{\infty} e^{-\rho_1^2} \rho_1 erf(\rho_1) d\rho_1 = 4\pi^{5/2} \frac{1}{2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left\{ \int_0^{\infty} e^{-2\rho_1^2} d\rho_1 \right\} \end{aligned} \quad (\text{Д.15})$$

Окончательно для интеграла получаем:

$$J = \sqrt{2}\pi^{5/2}. \quad (\text{Д.16})$$

ЛИТЕРАТУРА

1. D. Bimberg, M. Grundmann, N. Ledentsov. *Quantum dot heterostructures*. John Wiley & Sons, 1999.
2. V. Klimov. *Nanocrystal quantum dots*. CRC Press, 2010.
3. Է. Մ. Ղազարյան, Ս. Գ. Պետրոսյան. *Կիսահաղորդչային նանոէլեկտրոնիկայի ֆիզիկական հիմունքները*. ՌՀՀ Հրատարակչություն, 2005.
4. P. Michler. *Single quantum dots: Fundamentals, applications and new concepts*. Vol. 90. Springer Science & Business Media, 2003.
5. T. Chakraborty. *Quantum Dots: A Survey of the Properties of Artificial Atoms*. Elsevier Science, 1999.
6. M. Green. *Semiconductor Quantum Dots: Organometallic and Inorganic Synthesis*. Royal Society of Chemistry, 2014.
7. Z. Wang. *Self-Assembled Quantum Dots*. Vol. 1. Springer Science & Business Media, 2007.
8. W. Lin-Wang, A. Zunger. Pseudopotential calculations of nanoscale CdSe quantum dots. *Physical Review B*, **53**:9579, April 1996.
9. K. Gerasimos, E. Sargent. *Colloidal quantum dot optoelectronics and photovoltaics*. Cambridge University Press, 2013.
10. B. Arvind, P. Smereka. Mechanisms of stranski-krastanov growth. *Journal of Applied Physics*. **111**:044321, August 2012.
11. B. Szafran, J. Adamowski, S. Bednarek. Ground and excited states of few-electron systems in spherical quantum dots. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **4**: 1-10, January 1999.
12. G. Cantele, D. Ninno, G. Iadonisi. Confined states in ellipsoidal quantum dots. *Journal of Physics: Condensed Matter* **12**:9019, July 2000.
13. L. Yu-Min, Y. Zhong-Yuan, R. Xiao-Min. The strain relaxation of InAs/GaAs self-organized quantum dot. *Chinese Physics B* **18**:881, August 2009.
14. H. Saghai, A. Asgari, H. Nejad, A. Rostami. A study in optical properties of AlGaIn/GaN pyramid and prism-shape quantum dots. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **41**: 245-253, December 2008.

15. K. Moiseev, P. Dement'ev, V. Romanov, M. Mikhailova. Quantum dots and quantum dashes in the narrow-gap InSb/InAsSbP system. *Journal of Crystal Growth* **318**: 379-384, March 2011.
16. S. Abe, J. Joos, L. Martin, Z. Hens, P. Smet. Hybrid remote quantum dot/powder phosphor designs for display backlights. *Light: Science & Applications* **6**: e16271, 2017.
17. J. Wolters, G. Buser, A. Horsley, L. Béguin, A. Jöckel, J. Jahn P. Treutlein. Simple atomic quantum memory suitable for semiconductor quantum dot single photons. *Physical review letters*, **119**: 060502, August 2017.
18. J. Welser, S. Tiwari, S. Rishton, K.Y. Lee, Y. Lee. Room temperature operation of a quantum-dot flash memory. *Electron Device Letters, IEEE* **18**: 278-280, June 1997.
19. P. Recher, E. Sukhorukov, D. Loss. Quantum dot as spin filter and spin memory. *Physical review letters* **85**:1962, August 2000.
20. M. Kroutvar, Y. Ducommun, D. Heiss, M. Bichler, D. Schuh, G. Abstreiter, J. Finley. Optically programmable electron spin memory using semiconductor quantum dots. *Nature* **432**:81-84, 2004.
21. J. Hwang, C. Yang, M. Veldhorst, N. Hendrickx, M. Fogarty, W. Huang, A. Dzurak. Impact of g-factors and valleys on spin qubits in a silicon double quantum dot. *Physical Review B* **96**:045302, February 2017.
22. K. Takemoto, Y. Nambu, T. Miyazawa, Y. Sakuma, T. Yamamoto, S. Yorozu, Y. Arakawa. Quantum key distribution over 120 km using ultrahigh purity single-photon source and superconducting single-photon detectors. *Scientific reports* **5**:14383, September 2015.
23. S. Gustavsson, R. Leturcq, B. Simovič, R. Schleser, T. Ihn, P. Studerus, K. Ensslin, D. Driscoll, A. Gossard. Counting statistics of single electron transport in a quantum dot. *Physical review letters* **96**: 076605, February 2006.
24. P. Lia, W. Liao, D. Kuo, S. Lin. Fabrication of a germanium quantum-dot single-electron transistor with large Coulomb-blockade oscillations at room temperature. *Applied physics letters* **85**: 1532-1534, July 2004.
25. T. Czerniuk, D. Wigger, A. V. Akimov, C. Schneider, M. Kamp, S. Höfling, D. R. Yakovlev, T. Kuhn, D. E. Reiter, M. Bayer. Picosecond control of quantum dot laser emission by coherent phonons. *Phys. Rev. Let.* **118**:133901, March 2017.

26. G. Liu, A. Stintz, H. Li, K. Malloy, L. Lester. Extremely low room-temperature threshold current density diode lasers using InAs dots in $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ quantum well. *Electronics Letters* **35**:1163-1165, July 1999.
27. N. Ledentsov. Quantum dot laser. *Semiconductor Science and Technology* **26**: 014001, November 2010.
28. K. Cho, E. Lee, W. Joo, E. Jang, T. Kim, S. Lee, S. Kwon, J. Han, B. Kim, B. Choi J. Kim. High-performance crosslinked colloidal quantum-dot light-emitting diodes. *Nature Photonics* **3**: 341-345, May 2009.
29. J. Steckel, J. Zimmer, S. Coe-Sullivan, N. Stott, V. Bulović M. Bawendi. Blue luminescence from (CdS) ZnS core-shell nanocrystals. *Angewandte Chemie International Edition* **43**: 2154-2158, April 2004.
30. P. Anikeeva, C. Madigan, J. Halpert, M. Bawendi, V. Bulović. Electronic and excitonic processes in light-emitting devices based on organic materials and colloidal quantum dots. *Physical Review B* **78**: 085434, 2008.
31. U. Woggon. *Optical properties of semiconductor quantum dots*. Springer, 1997.
32. A. Yoffe. Semiconductor quantum dots and related systems: electronic, optical, luminescence and related properties of low dimensional systems. *Advances in physics* **50**:1-208, 2001.
33. N. Aghekyan, E. Kazaryan, A. Kostanyan, H. Sarkisyan. Two electronic states and state exchange time control in spherical nanolayer. *Superlattices and Microstructures* **50**: 199-206, 2011.
34. N. Aghekyan, E. Kazaryan, H. Sarkisyan. Two electron states in a thin spherical nanolayer: reduction to the model of two electrons on a sphere. *Few-Body Systems* **53**: 505-513, 2012.
35. P. Reiss, M. Protiere, L. Li. Core/shell semiconductor nanocrystals. *small* **5**: 154-168, 2009.
36. I. Akimov, K. Kavokin, A. Hundt, F. Henneberger. Electron-hole exchange interaction in a negatively charged quantum dot. *Physical Review B* **71**: 075326, 2005.
37. S. Rodt, R. Heitz, A. Schliwa, R. Sellin, F. Guffarth, D. Bimberg. Repulsive exciton-exciton interaction in quantum dots. *Physical Review B* **68**: 035331, 2003.
38. T. Chakraborty, P. Pietiläinen. Electron-electron interaction and the persistent current in a quantum ring. *Physical Review B* **50**: 8460, 1994.

39. U. Merkt, J. Huser, M. Wagner. Energy spectra of two electrons in a harmonic quantum dot. *Physical Review B* **43**: 7320, 1991.
40. A. Kumar, S. Laux, F. Stern. Electron states in a GaAs quantum dot in a magnetic field. *Physical Review B* **42**: 5166, 1990.
41. R. García-Castelán, W. Choe, Y. Lee. Correlation energies for two interacting electrons in a harmonic quantum dot. *Phys. Rev. B* **57**: 9792–9806, 1998.
42. J. Zhu, J. Yu, Z. Li, Y. Kawazoe. Exact solutions of two electrons in a quantum dot. *Journal of Physics: Condensed Matter* **8**: 7857, 1996.
43. M. El-Said. Spectroscopic structure of two interacting electrons in a quantum dot by the shifted $1/N$ expansion method. *Physical Review B* **61**: 13026, 2000.
44. R. Pino, V. Villalba. Calculation of the energy spectrum of a two-electron spherical quantum dot. *Journal of Physics: Condensed Matter* **13**: 11651-11660, 2001.
45. B. Kandemir. Variational study of two-electron quantum dots. *Physical Review B* **72**: 165350, 2005.
46. R. Nazmitdinov. Magnetic field and symmetry effects in small quantum dots. *Physics of Particles and Nuclei* **40**: 71-92, 2009.
47. P. Maksym, T. Chakraborty. Quantum dots in a magnetic field: Role of electron-electron interactions. *Physical review letters* **65**: 108, 1990.
48. D. Chuu, C. Hsiao, W. Mei. Hydrogenic impurity states in quantum dots and quantum wires. *Physical Review B* **46**: 3898, 1992.
49. C. Bose. Binding energy of impurity states in spherical quantum dots with Parabolic confinement. *Journal of Applied Physics* **83**: 3089, 1998.
50. C. Bose. Perturbation calculation of impurity states in spherical quantum dots with parabolic confinement. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **4**:180-184, 1999.
51. E. Kazaryan, L. Petrosyan, H. Sarkisyan. Impurity levels in a parabolic quantum dot under action of a strong magnetic field. *International Journal of Modern Physics B* **15**: 4103, 2001.
52. W. Xie. Impurity effect on low-lying spectra in a two-electron quantum dot with parabolic confinement. *Physica B: Condensed Matter* **334**:317-322, 2003.
53. L. Davidovich, E. Lifshitz. *Quantum mechanics: non-relativistic theory*. Vol. 3. Elsevier, 2013.

54. В. Левич. *Курс теоретической физики*. Том 2 М., Наука, 1971.
55. А. Давыдов. *Квантовая механика*, М.: Наука, 1973.
56. F. Lelarge, B. Dagens, J. Renaudier, R. Brenot, A. Accard, F. Dijk, D. Make, et al. Recent Advances on InAs/InP Quantum Dash Based Semiconductor Lasers and Optical Amplifiers Operating at 1.55 μ m. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics* **13**: 111-124, 2007.
57. H. Asghar, E. Sooudi, P. Kumar, W. Wei, J. McInerney. Optimum stabilization of self-mode-locked quantum dash lasers using dual optical feedback with improved tolerance against phase delay mismatch. *Optics express* **25**: 15796-15805, 2017.
58. R. Alizon, A. Bilenca, H. Dery, V. Mikhelashvili, G. Eisenstein. Cross-gain modulation in inhomogeneously broadened gain spectra of InP-Based 1550 nm quantum dash optical amplifiers: Small-signal bandwidth dependence on wavelength detuning. *Applied physics letters* **82** :4660, 2003.
59. A. Ukhanov, R. Wang, T. Rotter, A. Stintz, L. Lester, P. Eliseev, K. Malloy. Orientation dependence of the optical properties in InAs quantum-dash lasers on InP. *Applied physics letters* **81**: 981, 2002.
60. K. Moiseev, V. Romanov P. Dement'ev, E. Ivanov. Nanoheterostructures with InSb quantum dashes inserted in the InAs unipolar matrix. *Journal of Crystal Growth* **414**:177, 2015.
61. D. Klein, R. Roth, A. Lim, A. Alivisatos, P. McEuen. A single-electron transistor made from a cadmium selenide nanocrystal. *Nature* **389**: 699, 1997.
62. C. Lent, B. Isaksen, M. Lieberman. Molecular quantum-dot cellular automata. *Journal of the American Chemical Society* **125**: 1056-1063, 2003.
63. T. Apostol. *Introduction to analytic number theory*, Springer Science & Business Media, USA, 2013.
64. A. Hall. 232. genealogy of Pythagorean triads. *Math. Gaz.* **54**:377, 1970.
65. R. Alperin. The modular tree of Pythagoras. *American Mathematical Monthly* **112**:807, 2005.
66. A. Efros, A. Efros. Interband absorption of light in a semiconductor sphere. *Soviet Physics Semiconductors-Ussr*, **16**: 772, 1982.
67. R. Nötzel. Self-organized growth of quantum-dot structures. *Semiconductor Science and Technology* **11**: 1365, 1996.

68. V. Romanov, P. Dement'ev, K. Moiseev. Specific features of nanosize object formation in an InSb/InAs system by metal-organic vapor-phase epitaxy. *Semiconductors* **47**: 443-448, 2013.
69. R. Kremzow, M. Pristovsek, M. Kneissl. Ripening of InAs quantum dots on GaAs (0 0 1) investigated with in situ scanning tunneling microscopy in metal-organic vapor phase epitaxy. *Journal of Crystal Growth* **310**, (2008) 4751-4753.
70. I. Lifshitz, V. Slyozov. The kinetics of precipitation from supersaturated solid solutions. *J. Phys. Chem. Solids* **19**: 35, 1961.
71. D. Hayrapetyan, E. Kazaryan, L. Petrosyan, H. Sarkisyan. Core/shell/shell spherical quantum dot with Kratzer confining potential: Impurity states and electrostatic multipoles. *Physica E* **66** 7-12, 2015.
72. S. Amirkhanyan, E. Kazaryan, H. Sarkisyan. Electrostatic multipoles created by electron localized in narrow-band cylindrical nanolayer. *Journal of Physics: Conference Series* **673**:012013, 2016.
73. K. Dvoyan, D. Hayrapetyan, E. Kazaryan. Direct interband light absorption in strongly prolated ellipsoidal quantum dots' ensemble. *Nanoscale research letters* **4**:106, 2009.
74. M. Bayer, M. Korkusinski, P. Hawrylak, T. Gutbrod, M. Michel, A. Forchel. Optical detection of the Aharonov-Bohm effect on a charged particle in a nanoscale quantum ring. *Physical review letters* **90**: 186801, 2003.
75. D. Valerini, A. Cretí, M. Lomascolo, L. Manna, R. Cingolani, M. Anni. Temperature dependence of the photoluminescence properties of colloidal CdSe/ZnS core/shell quantum dots embedded in a polystyrene matrix. *Physical Review B* **71**: 235409, 2005.
76. C. Murray, D. Norris, M. Bawendi, Synthesis and characterization of nearly monodisperse CdE (E = sulfur, selenium, tellurium) semiconductor nanocrystallites. *Journ. Am. Chem. Soc.* **115**:8706, 1993.
77. B. Dabbousi, J. Rodriguez-Viejo, F. Mikulec, J. Heine, H. Mattoussi, R. Ober, K. Jensen, M. Bawendi. (CdSe) ZnS core-shell quantum dots: synthesis and characterization of a size series of highly luminescent nanocrystallites. *J. Phys. Chem. B* **101**: 9463, 1997.
78. P. Reiss, J. Bleuse, A. Pron. Highly luminescent CdSe/ZnSe core/shell nanocrystals of low size dispersion. *Nano Lett.* **2**: 781, 2002.
79. A. C. Bartnik, F. W. Wise, A. Kigel, E. Lifshitz. Electronic structure of Pb Se/Pb S core-shell quantum dots. *Physical Review B* **75**:245424, 2007.

80. D. Schooss, A. Mews, A. Eychemüller, H. Weller. Quantum-dot quantum well CdS/HgS/CdS: Theory and experiment. *Physical Review B* **49**: 17072, 1994.
81. D. Hayrapetyan, E. Kazaryan, L. Petrosyan, H.A. Sarkisyan. Core/shell/shell spherical quantum dot with Kratzer confining potential: Impurity states and electrostatic multipoles. *Physica E* **66**: 7-12, 2015.
82. W. Tan, J. Inkson. Electron states in a two-dimensional ring-an exactly soluble model. *Semiconductor science and technology* **11**: 1635, 1996.
83. P. Winternitz, Y. Smorodinsky, M. Uhlir, I. Fris. Symmetry groups in classical and quantum mechanics. *J. Nucl. Phys.* **4**: 444, 1967.
84. A. Atayan, E. Kazaryan, A. Meliksetyan, H. Sarkisyan. Magnetoexcitonic states in a quantum ring with the Winternitz-Smorodinsky confinement potential. *Journal of Contemporary Physics* **45**: 126, 2010.
85. A. Atayan, E. Kazaryan, A. Meliksetyan, H. Sarkisyan. Interband magnetoabsorption in cylindrical quantum layer with Smorodinsky-Winternitz confinement potential. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience* **7**: 1165, 2010.
86. S. Park, S. Link, W. Miller, A. Gesquiere, P. Barbara. Effect of electric field on the photoluminescence intensity of single CdSe nanocrystals. *Chemical Physics* **341**:169, 2007.
87. T. Cheche, M. Chang, S. Lin. Electron–phonon interaction in absorption and photoluminescence spectra of quantum dots. *Chemical physics* **309**: 109, 2005.
88. W. Xie. Optical properties of an off-center hydrogenic impurity in a spherical quantum dot with Gaussian potential. *Superlattices and Microstructures* **48**: 239-247, 2010.
89. E. Niculescu, M. Cristea. Impurity states and photoionization cross section in CdSe/ZnS core–shell nanodots with dielectric confinement. *Journal of Luminescence* **135**:120-127, 2013.
90. L. Burileanu. Photoionization cross-section of donor impurity in spherical quantum dots under electric and intense laser fields. *Journal of Luminescence* **145**: 684-689, 2014.
91. C. Somaschini, S. Bietti, S. Sanguinetti, N. Koguchi, A. Fedorov. Self-assembled GaAs/AlGaAs coupled quantum ring-disk structures by droplet epitaxy. *Nanotechnology* **21**:125601, 2010.

92. U. Keyser, S. Borck, R. Haug, M. Bichler, G. Abstreiter W. Wegscheider. Aharonov–Bohm oscillations of a tuneable quantum ring. *Semiconductor Science and Technology* **17**: 22, 2002.
93. G. Farias, M. Degani, J. Freire, J. Costa e Silva, R. Ferreira. Impurities and geometrical effects on the electron energy spectrum of quantum rings. *Physical Review B* **77**: 085316, 2008.
94. J. Elzerman, R. Hanson, J. Greidanus, L. Willems van Beveren, S. De Franceschi, L. Vandersypen, S. Tarucha, L. Kouwenhoven. Few-electron quantum dot circuit with integrated charge read out. *Physical Review B* **67**: 161308, 2003.
95. Y. Krasny, N. Kovalenko, U. Krey, L. Jacak. Paramagnetic-diamagnetic interplay in quantum dots for non-zero temperatures. *Journal of Physics: Condensed Matter* **13**: 4341, 2001.
96. B. Boyacioglu, A. Chatterjee. Heat capacity and entropy of a GaAs quantum dot with Gaussian confinement. *Journal of applied physics* **112**: 083514, 2012.
97. B. Boyacioglu, A. Chatterjee. Magnetic properties of semiconductor quantum dots with gaussian confinement. *International Journal of Modern Physics B* **26**: 1250018, 2012.
98. S. Gumber, M. Kumar, M. Gambhir, M. Mohan, P. Jha. Thermal and magnetic properties of cylindrical quantum dot with asymmetric confinement. *Canadian Journal of Physics* **93**: 1264-1268, 2015.
99. R. Khordad, H. Sedehi. Thermodynamic Properties of a Double Ring-Shaped Quantum Dot at Low and High Temperatures. *Journal of Low Temperature Physics* **190**: 200-212, 2018.
100. C. Jain, D. Roulston. A simple expression for band gap narrowing (BGN) in heavily doped Si, Ge, GaAs and $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ strained layers. *Solid-State Electronics* **34**: 453-465, 1991.
101. L. Pavesi, G. Mario. Photoluminescence of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ alloys. *Journal of Applied Physics* **75**:4779, 1994.
102. C. Le Sech. Simple correlated wavefunction for two-electron diatomic molecules. Application to H_2 and He_2^+ systems. *Chemical physics letters* **200**: 369-372, 1992.
103. T. Kato. On the eigenfunctions of many-particle systems in quantum mechanics. *Communications on Pure and Applied Mathematics* **10**: 151-177, 1957.

104. R. Pack, W. Brown. Cusp conditions for molecular wavefunctions. *The Journal of Chemical Physics* **45**: 556-559, 1966.
105. A. Sali, H. Satori, M. Fliyou, H. Loumrhari. The Photoionization Cross-Section of Impurities in Quantum Dots. *Physica status solidi (b)* **232**: 209-219, 2002.
106. B. Ridley. *Quantum Processes in Semiconductors*, Clarendon Press, Oxford 1982.
107. P. Moon, D. Spencer. *Field theory handbook: including coordinate systems, differential equations and their solutions*. Springer, 2012.
108. A. Lorke, R. Luyken, A. Govorov, J. Kotthaus, J. Garcia, P. Petroff. Spectroscopy of nanoscopic semiconductor rings. *Phys. Rev. Lett.* **84**: 2223, 2000.
109. A. Fuhrer, S. Lüscher, T. Ihn, T. Heinzel, K. Ensslin, W. Wegscheider, M. Bichler. Energy spectra of quantum rings. *Nature* **413**: 822-825, 2001.
110. S. Bellucci, P. Onorato. Quantum rings with tunnel barriers in a threading magnetic field: Spectra, persistent current and ballistic conductance. *Physica E* **41**: 1393-1402, 2009.
111. A. Bruno-Alfonso, A. Latgé. Quantum rings of arbitrary shape and non-uniform width in a threading magnetic field. *Physical Review B* **77**: 205303, 2008.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ В ДИССЕРТАЦИИ СОКРАЩЕНИЙ

- КЯ – квантовая яма
- КП – квантовая проволока
- КТ – квантовая точка
- НЗ – носитель заряда
- РК – размерное квантование
- МЛЭ – молекулярно-лучевая эпитаксия
- ФПС – функция плотности состояний
- ФЛ – фотолюминесценция
- ФИ – фотоионизации
- МКЭ – метода конечных элементов

СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. D. Baghdasaryan, E. Kazaryan, H. Sarkisyan. Two-electron states and state exchange time control in parabolic quantum dot. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **58**: 67-72, 2014.
2. D. Baghdasaryan, H. Ghaltaghchyan, E. Kazaryan, H. Sarkisyan. Two-electron impurity in the parabolic quantum dot: Uncertainty relation and perturbation approach. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **70**: 52-57, 2015.
3. D. Baghdasaryan, E. Kazaryan, H. Sarkisyan, K. Moiseev. Optical “visualization” of Pythagorean triples and electrostatic multipoles in quantum dash. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **90**: 170-174, 2017.
4. D. Baghdasaryan. Interband and intraband optical light absorption in quantum dash systems. *SPIE Proceedings: In Modeling Aspects in Optical Metrology VI* **10330**, p. 103301, June 2017.
5. D. Baghdasaryan, E. Kazaryan, H. Sarkisyan. Photoionization and electrostatic multipoles properties of spherical core/shell/shell quantum nanolayer with off-center impurity. *Superlattices and Microstructures* **104**: 69-77, 2017.
6. D. Baghdasaryan, D. Hayrapetyan, H. Sarkisyan, E. Kazaryan, S. Pokutnyi. Exciton states and direct interband light absorption in the ensemble of toroidal quantum dots. *Journal of Nanophotonics* **11**: 046004, 2017.
7. D. Baghdasaryan, D. Hayrapetyan, E. Kazaryan, H. Sarkisyan. Thermal and magnetic properties of electron gas in toroidal quantum dot. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **101**: 1-4, 2018.
8. D. Hayrapetyan, D. Baghdasaryan, E. Kazaryan, S. Pokutnyi, H. Sarkisyan. Exciton states and optical absorption in core/shell/shell spherical quantum dot. *Chem. phys.* **506**:26-30, 2018.

БЛАГОДАРНОСТИ

Выражаю глубокую благодарность и признательность моему научному руководителю – д. ф.-м. н., профессору А. А. Саркисяну за руководство диссертацией и поддержку, оказанную при выполнении работы.

Считаю приятным долгом выразить благодарность директору ИМВТ РАУ академику НАН РА Э. М. Казаряну за ценные советы и внимание относительно написания диссертационной работы.

Искренне благодарен своим соавторам, к. ф.-м. н., доценту Д. Б. Айрапетяну за совместную научную работу.