

ՀՀ ԿՐԹՈՒԹՅԱՆ ԵՎ ԳԻՏՈՒԹՅԱՆ ՆԱԽԱՐԱՐՈՒԹՅՈՒՆ  
ԵՐԵՎԱՆԻ ՊԵՏԱԿԱՆ ՀԱՄԱԼՍԱՐԱՆ

Բաղդասարյան Դավիթ Արթուրի

Փոխանակային երևույթները և օպտիկական կլանումը քվանտային  
կետերում և զծիկներում

Ա.04.10 – «Կիսահաղորդիչների ֆիզիկա» մասնագիտությամբ  
ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների թեկնածուի գիտական  
աստիճանի հայցման ատենախոսության

Ս Ե Ղ Մ Ա Գ Ի Ը

ԵՐԵՎԱՆ – 2018

---

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РА  
ЕРЕВАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Багдасарян Давид Артурович

Обменные эффекты и оптическое поглощение в квантовых точках и штрихах

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

диссертации на соискание ученой степени кандидата физико –  
математических наук  
по специальности У.04.10– “Физика полупроводников”

ЕРЕВАН – 2018

Ատենախոսության թեման հաստատվել է Հայ-Ռուսական համալսարանում

Գիտական ղեկավար՝ ֆիզ.մաթ. գիտ. դոկտոր, պրոֆեսոր  
Հ.Ա. Սարգսյան, ՀՌՀ

Պաշտոնական ընդդիմախոսներ՝ ֆիզ.մաթ. գիտ. դոկտոր, պրոֆեսոր  
Ա.Լ. Վարդանյան, ԵՊՀ  
ֆիզ.մաթ. գիտ. դոկտոր, պրոֆեսոր  
Կ.Հ. Ահարոնյան, ՀԱՊՀ

Առաջատար կազմակերպություն՝ ԵՊՀ կիսահաղորդյունների ֆիզիկայի ամբիոն  
Ատենախոսության պաշտպանությունը տեղի կունենա 2018թ. Մայիսի 26-ին, ժամը 12-ին  
Երևանի պետական համալսարանի ֆիզիկայի 049 մասնագիտական խորհրդի նիստում:  
Հասցե՝ 0025, Երևան, Ա. Մանուկյան 1

Ատենախոսությանը կարելի է ծանոթանալ ԵՊՀ գրադարանում:

Սեղմագիրը ցրված է 2018թ. ապրիլի 25-ին

Մասնագիտական խորհրդի  
գիտական քարտուղար՝  ֆիզ.մաթ. գիտ. դոկտոր, պրոֆեսոր  
Կ.Ս. Ղամբարյան, ԵՊՀ

---

Тема диссертации утверждена в Российско-Армянском университете

Научный руководитель: доктор физ.-мат. наук, профессор  
А.А. Саркисян, РАУ

Официальные оппоненты: доктор физ.-мат. наук, профессор  
А.Л. Варданян, ЕГУ  
доктор физ.-мат. наук, профессор  
К.Г. Агаронян, НПУА

Ведущая организация: Кафедра физики полупроводников ЕГУ

Защита диссертации состоится 26 мая 2018г. в 12 часов на заседании  
специализированного совета по физике 049 Ереванского государственного университета  
по адресу: 0025, Ереван, ул. А. Манукяна 1

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ЕГУ.

Автореферат разослан 25 апреля 2018г.

Ученый секретарь  
специализированного совета՝  доктор физ.-мат. наук, профессор  
К.М. Гамбарян, ЕГУ

## **ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ**

### **Актуальность исследования**

На сегодняшний день квантовые точки (КТ) рассматриваются в качестве перспективных кандидатов на роль элементной базы для приборов нового поколения [1,2]. В частности, они могут быть использованы в чипах памяти [3-4], при создании кубитов на основе электронных и спиновых состояний [5,6], в процессе разработки приборов квантовой криптографии [7], а также возможно их применение для создания одноэлектронного транзистора [8]. Другим важным применением КТ являются оптические приборы, такие как низкотемпературные лазеры [9,10], а также светодиоды [11] на основе КТ. Из сказанного следует, что изучение физических процессов в КТ различных геометрических форм и размеров продолжает оставаться актуальной задачей современной нанопластики и наноплектроники.

Большое количество работ как теоретического, так и экспериментального характера посвящены описанию электронных и оптических характеристик КТ [1,2]. Примечательно, что возможность гибкой манипуляции энергетическими уровнями носителей зарядов в КТ позволяет получать структуры с наперед заданными физическими характеристиками [1]. 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, которые имеют сугубо квантовый характер [12]. Благодаря размерному квантованию величина обменного взаимодействия может контролироваться путем изменения геометрических размеров, а также формы КТ. Примером сказанного является искусственный атом гелия или двухэлектронная КТ [13]. Наличие стенок КТ является фактором локализации электронов внутри нее, при этом, меняя размеры КТ, возможно менять область локализации электронов, что отразится на перекрытии их волновых функций и, следовательно, приведет к изменению величины обменного взаимодействия. Поэтому изучение такого класса задач даст дополнительную информацию с одной стороны об энергетической структуре КТ, а с другой - об особенностях взаимодействия электронов.

Наряду с КТ в последние годы объектом пристального изучения стали квантовые штрихи (КШ) [14]. Это структуры, имеющие геометрию параллелепипеда

или же усеченной призмы, одна из сторон которых значительно меньше двух других. Одноэлектронный спектр в КШ имеет ярко выраженный подзонный характер, что, безусловно, отражается на оптических характеристиках КШ, при этом частотный диапазон поглощения и излучения лежит в инфракрасной области, и это обстоятельство делает изучение данных структур важной задачей с точки зрения применения полученных результатов при создании новых приборов инфракрасного диапазона [14]. В свете сказанного, актуальной становится проблема изучения межзонного оптического поглощения в КШ как формы параллелепипеда, так и усеченной призмы.

Другим классом нульмерных структур с нетривиальной геометрией являются слоистые и кольцеобразные КТ. Эти структуры примечательны тем, что есть возможность наблюдать в них квантовые топологические эффекты, такие как эффект Ааронова-Бома [15]. Традиционно, кольцеобразные наноструктуры моделируются либо двумерными, либо в качестве цилиндрических нанослоев конечной высоты. Вместе с тем вызывает интерес изучение КТ с тороидальной геометрией - более близкой к реальным квантовым кольцам, так как наличие радиуса сечения тора может стать дополнительным фактором управления спектром носителей заряда. Геометрия выколотого центра может сыграть принципиальную роль в поведении носителей зарядов, локализованных в слоистых и кольцеобразных структурах.

Резюмируя, можно сказать, что исследование электронных, обменных, оптических и термодинамических характеристик нульмерных структур различных геометрических форм продолжает оставаться актуальной задачей современной теоретической нанофизики. Именно этим вопросам посвящена данная диссертационная работа.

### **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**

1. Исследован характер зависимости времени обмена состояниями в параболической КТ сферической формы как при наличии, так и в отсутствие примеси.
2. Изучено межзонное оптическое поглощение в КШ, имеющих форму параллелепипеда и усеченной призмы. Продемонстрирована теоретическая возможность оптической «визуализации» пифагоровых троек в ансамбле КШ.
3. Выявлен характер межзонного оптического поглощения, а также фотоионизации смещенного примесного центра в сферических слоистых наноструктурах.
4. 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 РАУ, а также докладывались на следующих научных конференциях:

- 10-я Юбилейная годовичная научная конференция РАУ 30.11- 4.12 2015, РАУ.
- 17-я Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике, Россия, Санкт-Петербург, 23 - 27 ноября 2015 г.
- 11-я Годичная научная конференция 5-9, 12, 2016, РАУ.
- 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-я Годичная научная конференция РАУ, посвященная 20-ти летию основания РАУ. 7-8 декабря.

### **Публикации**

По теме диссертации опубликовано 8 работ. Список приводится в конце автореферата.

### **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 рисунок, 9 таблиц и 111 наименований литературы.

### **СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

**Во введении** дан обзор научной литературы, посвященной тематике диссертационной работы. Представлена информация об основных квантомеханических методах описания наноструктур. Сформулированы цели диссертации и приведены ее основные положения.

**Первая глава** диссертации посвящена изучению двухэлектронных состояний в параболической КТ сферической формы как в отсутствие, так и при наличии примеси в центре КТ. По аналогии с теорией атома гелия рассмотрены обменные эффекты в указанных системах.

**В параграфе 1.1** приведен обзор литературы, посвященной двухэлектронным и примесным состояниям в КТ.

**В параграфе 1.2** представлена задача о поведении двухэлектронной системы в параболической КТ. На первой стадии проведена оценка энергии основного состояния системы на основе соотношения неопределенностей Гейзенберга. Исходя из классического выражения для энергии указанной системы и используя условия минимизации энергии, для основного уровня определена ее зависимость от радиуса КТ, представленная на Рис. 1. Далее система описывается в рамках стационарной теории возмущений. Если 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 волновых функций:

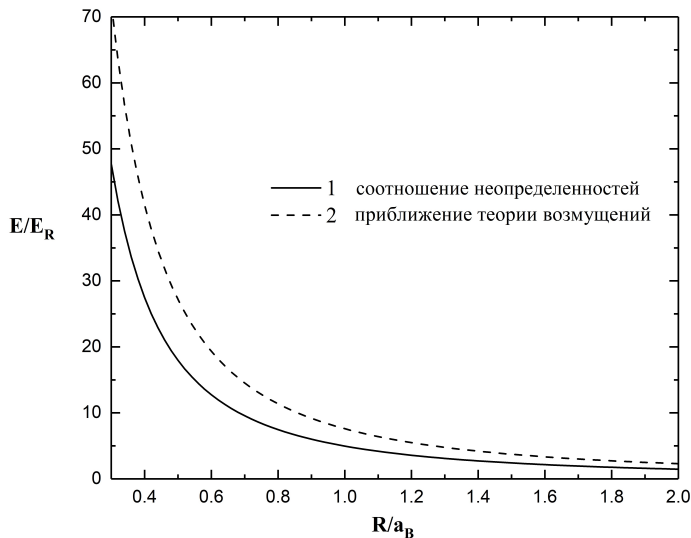
$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2). \quad (1)$$

Согласно теории возмущений, поправка к энергии определяется следующим выражением:

$$E = 3\hbar\omega + \langle \hat{V} \rangle, \quad (2)$$

где  $\langle \hat{V} \rangle$  - среднее значение оператора взаимодействия электронов. Рассчитав эту поправку по невозмущенным волновым функциям, получаем:

$$\langle \hat{V} \rangle = (e^2/\varepsilon a_B) \pi^{-1/2} \sqrt{2}. \quad (3)$$



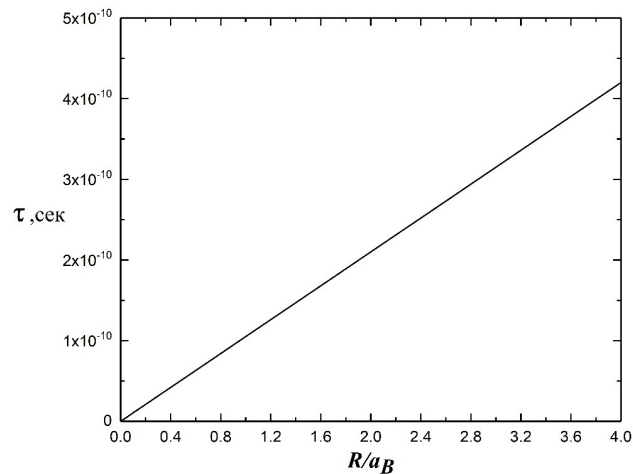
**Рис. 1.** Зависимость энергии основного состояния двух электронов, локализованных в параболической КТ сферической формы, от радиуса КТ; 1 - энергия в первом приближении теории возмущений, 2 - оценка энергии на основе соотношения неопределенностей.

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

Учет спина в системе приводит к необходимости симметризации волновой функции. Вследствие чего возникают квантовые обменные эффекты, характеризующиеся обменным интегралом:

$$A = \int \psi_1^*(\mathbf{r}_1)\psi_2^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|} \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (4)$$

Известно [13], что время обмена состояниями определяется обменным интегралом. 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  $\tau = \pi\hbar/2A$  они обменяются состояниями. На Рис. 2 приведена зависимость времени обмена состояниями от радиуса КТ.



**Рис. 2.** Зависимость времени обмена состояниями между электронами двухэлектронной примеси от радиуса параболической КТ.

Из него 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.

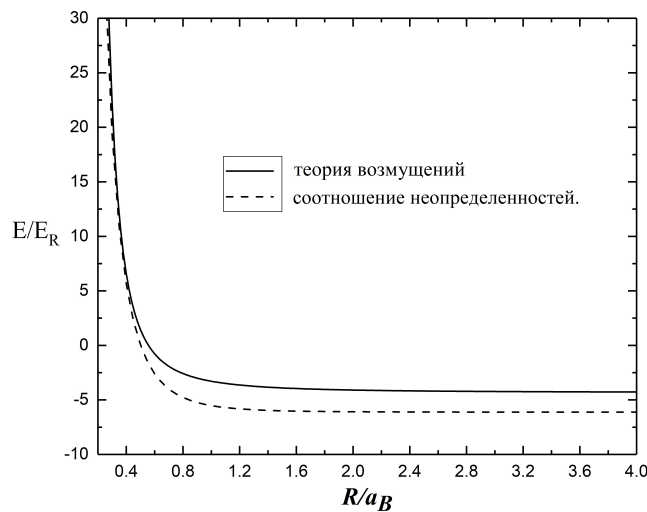
**В параграфе 1.3** изучена двухэлектронная примесь, локализованная в центре сферической КТ с параболическим ограничивающим потенциалом. По аналогии с



предыдущим параграфом проводится оценка радиуса локализации и энергии основного состояния системы. Далее, для нахождения спектра энергии и волновых функций используется метод вариации со следующей пробной радиальной одночастичной волновой функцией:

$$\psi_{tr}(\rho, \lambda) = C(\lambda) \exp(-\beta \rho^2 / \lambda) \exp(-\lambda \rho), \quad (5)$$

где  $\lambda$  - параметр вариации,  $\beta = \hbar \omega / 2E_R$  - безразмерная величина параболического потенциала,  $C(\lambda)$  - нормировочный коэффициент. Аналогично предыдущему случаю, определяется поправка электрон-электронного взаимодействия. При этом для полной энергии системы получается, представленная на Рис. 3, зависимость от радиуса КТ.



**Рис. 3.** Зависимость энергии основного состояния двухэлектронной примеси от радиуса КТ, определенная в рамках теории возмущений (сплошная кривая), а также на основании соотношения неопределенностей (пунктирная кривая).

Как видно из рисунка, энергия двухэлектронной системы монотонно уменьшается с увеличением радиуса КТ, переходя из области положительных значений в область отрицательных. Отметим, что с увеличением радиуса КТ время обмена состояниями будет увеличиваться, так как будет уменьшаться обменный интеграл: электроны "чувствуют" друг друга слабее и обмен состояниями становится менее вероятным. Однако в случае наличия примеси зависимость нелинейная и при больших радиусах выходит на плато.

**Вторая глава** диссертации посвящена изучению особенностей одноэлектронного спектра и межзонного оптического поглощения в КШ, имеющих форму параллелепипеда и усеченной призмы.

**В параграфе 2.1** представлены последние результаты по выращиванию КШ, приведены сведения о структурном составе этих нульмерных систем и представлены наиболее важные результаты по их изучению.

**В параграфе 2.2** рассмотрена задача об одноэлектронных состояниях и межзонном оптическом поглощении в КШ, имеющем форму параллелепипеда, одна сторона которого имеет значительно меньшие размеры по сравнению с двумя другими. Ограничивающий потенциал КШ моделируется прямоугольными бесконечно глубокими стенками. Если считать, что в направлении  $oZ$  толщина КШ значительно меньше, чем в направлениях  $oY$  и  $oX$ :

$$L_z \ll \{L_x, L_y\}, \quad (6)$$

то частица вдоль данного направления будет находиться в основном состоянии, и задача станет эффективно двумерной. Двумерные спектр энергии и соответствующая волновая функция будут иметь вид:

$$E_{n_1, n_2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu_e} \sum_{j=1}^2 \left( \frac{n_j}{L_j} \right)^2, \quad (7)$$

$$\Psi_{n_1, n_2}(x, y) = \prod_{j=1}^2 \sqrt{\frac{2}{L_j}} \sin \frac{\pi n_j}{L_j} x_j. \quad (8)$$

Из выражения (7) следует, что при квадратном сечении плоскости КШ, когда  $L_x = L_y \equiv L$  налицо двукратное вырождение уровней энергии. Однако для состояний  $\Psi_{1,7}(x, y)$ ,  $\Psi_{7,1}(x, y)$ , а также  $\Psi_{5,5}(x, y)$  реализуется одна и та же энергия:

$$E_{7,1} = E_{1,7} = E_{5,5} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu_e L^2} 50. \quad (9)$$

Это вырождение не является случайным. Заметим, что между квантовыми числами  $n_1, n_2$  и  $n_3$  имеется общая связь:

$$n_1^2 + n_2^2 = 2n_3^2. \quad (10)$$

Если ввести следующие обозначения:

$$\frac{n_1 - n_2}{2} = a, \quad \frac{n_1 + n_2}{2} = b,$$

где  $a$  и  $b$  - натуральные числа, то легко заметить, что связь между  $a$ ,  $b$  и  $n_3$  определяется теоремой Пифагора:

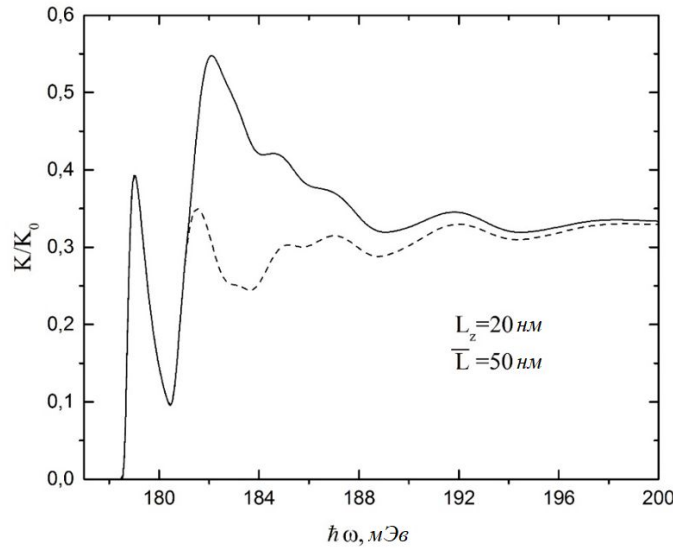
$$a^2 + b^2 = n_3^2. \quad (11)$$

Иначе говоря, существует бесконечное множество трехкратно вырожденных уровней, определяемых пифагоровыми тройками. При этом важно отметить, что переход от одной примитивной пифагоровой тройки к другой реализует модулярная группа  $\Gamma(2)$ , которая также является группой преобразования спиноров.

Наличие трехкратно вырожденных уровней естественным образом отразится на характере межзонного оптического поглощения в указанной системе. В частности, при режиме квантования, не учитывающем экситонные эффекты, для коэффициента межзонного поглощения можно записать:

$$K(\omega, L_1, L_2, L_3) = 2K_0 \sum_{v_e, v_h} \delta(\hbar\omega - E_g - E_{v_e}^e - E_{v_h}^h) + 3K_0 \sum_{\text{Pythagorean triples}} \delta(\hbar\omega - E_g - E_{v_e}^e - E_{v_h}^h) \quad (12)$$

Если теперь рассматривать ансамбль из КШ, то можно показать, что с учетом дисперсии по размерам КШ в рамках модели Лифшица – Слезова, профили кривых поглощения, с учетом трехкратно вырожденных уровней и без их учета, сильно отличаются (Рис. 4). Таким образом, возникает теоретическая возможность оптической «визуализации» пифагоровых троек в КШ.



**Рис. 4.** Зависимость коэффициента поглощения КШ от энергии падающего фотона с (сплошная кривая) и без (пунктирная кривая) учета переходов, связанных с трижды вырожденными энергетическими уровнями:

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

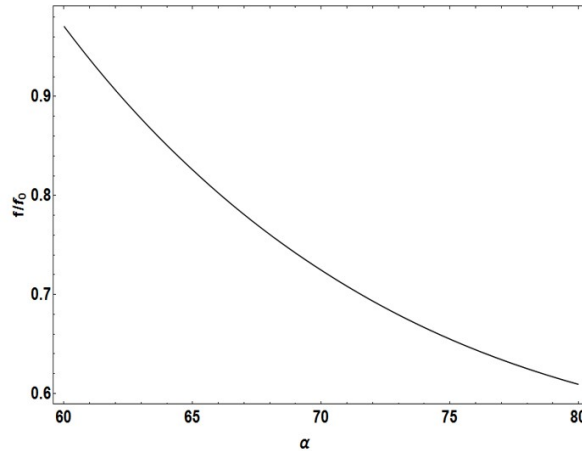
**В параграфе 2.3** рассматриваются мультипольные поправки к полю, создаваемому электроном, локализованным в КШ в форме параллелепипеда. Дипольный момент и тензор квадрупольного момента электрона определяются как:

$$\vec{d} = \int \Psi^* e\vec{r}\Psi dV, \quad Q_{ik} = \int \Psi^* \{3ij - \delta_{ij}r^2\}\Psi dV, \quad i, j = x, y, z. \quad (13)$$

В приближении двух первых членов мультипольного разложения, для потенциала, создаваемого электроном, локализованным в КШ, получаем:

$$\varphi(x, 0, 0) = \frac{e}{\varepsilon x} + \frac{eL_x}{2\varepsilon x^2} + \frac{e}{12\varepsilon x^3} \left( L_x^2 \left( 4 - \frac{6}{n_x^2 \pi^2} \right) + L_y^2 \left( \frac{3}{n_y^2 \pi^2} - 2 \right) + L_z^2 \left( \frac{3}{n_z^2 \pi^2} - 2 \right) \right). \quad (14)$$

**В параграфе 2.4** исследуются межзонные переходы в КШ в форме усеченной призмы. Проблема рассматривается в рамках адиабатического метода. Прямое межзонное поглощение рассматривается в трех режимах размерного квантования. На Рис. 5 приведена зависимость силы осциллятора  $f/f_0 = \left| \int \Psi_\nu^e \Psi_\nu^h d^3\vec{r}_e d^3\vec{r}_h \right|^2$  в промежуточном режиме размерного квантования от угла раствора призмы,  $f_0$  - сила осциллятора объемного материала.



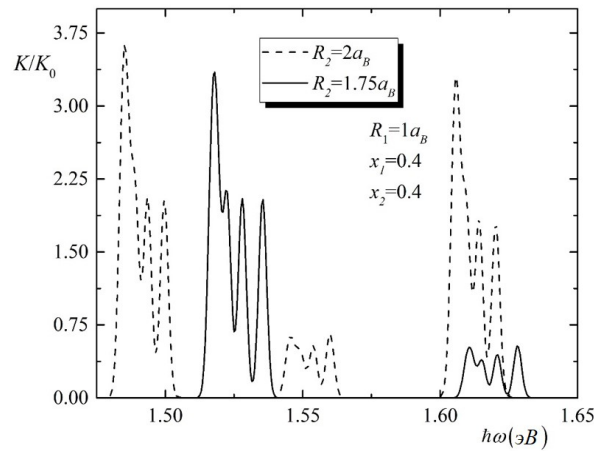
**Рис. 5.** Зависимость силы осциллятора для межзонных переходов в режиме промежуточного РК от угла призмы  $\alpha$ .

Как видно из Рис. 5, с увеличением угла раствора призмы уменьшается сила осциллятора для межзонных переходов. Это может быть объяснено тем фактом, что с увеличением угла раствора призмы увеличивается эффективный объем квантовой наноструктуры, ослабевает эффект размерного квантования и носители заряда локализуются на большем расстоянии.

**Третья глава** диссертационной работы 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 слабовзаимодействующего электронного газа в КТ, имеющей форму тороида.

**В параграфе 3.1** представлено введение в третью главу и дан обзор литературы, посвященной слоистым и кольцеобразным наноструктурам.

**В параграфе 3.2** изучены оптические свойства сферической КТ ядро/оболочка/оболочка (core/shell/shell) с потенциалом ограничения Винтерница-Сморозинского. Рассмотрено прямое межзонное оптическое поглощение в ансамбле таких структур с учетом дисперсии по их размерам. Зависимость коэффициента межзонного поглощения от энергии падающего фотона представлена на Рис. 6.

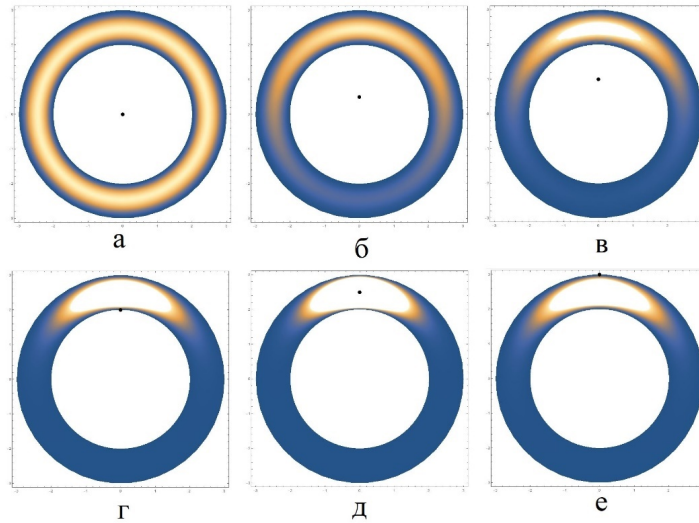


**Рис. 6.** Зависимость коэффициента поглощения от энергии падающего фотона.  $x_1$  и  $x_2$  - концентрации  $Al$  в основной и внешней оболочке,  $R_1$ ,  $R_2$  - внутренний и внешний радиусы квантового нанослоя.

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.

**В параграфе 3.3** исследуются энергетический спектр и характер сечения фотоионизации водородоподобной примеси, локализованной в сферической слоистой

системе core/shell. При этом рассматриваются различные положения примеси относительно геометрического центра системы. На Рис.7 приведены плотности вероятности распределения примесного электрона в зависимости от точки расположения примеси в сечении сферического нанослоя. Как следует из приведенных рисунков, смещение примеси от центра приводит к нарушению сферически-симметричного распределения электронного облака. Примечательно, что электрон максимально локализован вокруг примеси, когда она находится посередине нанослоя (Рис.7).



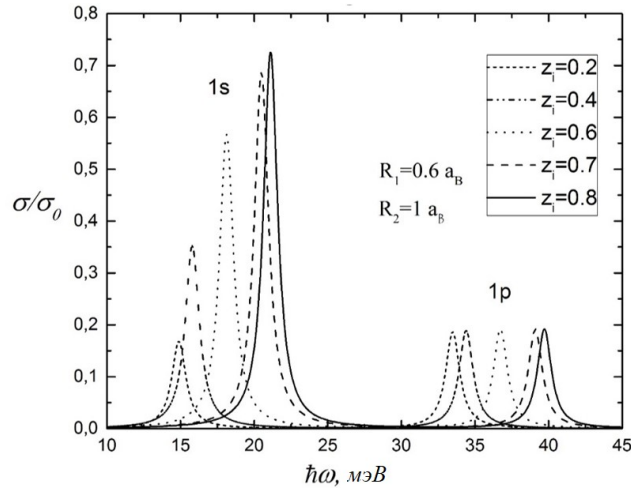
**Рис. 7.** Плотность вероятности электрона в сечении сферического слоя для различных положений примеси  $z_i$  равных 0(а), 0.5(б), 1(в), 2(г), 2.5(д), 3(е) в единицах  $a_B$ .

Далее исследуется сечение фотоионизации такой системы, которое определяется как вероятность перехода с основного примесного состояния в континуум подзон под воздействием оптического возбуждения.

$$\sigma(\hbar\omega) = \sigma_0 \hbar\omega \sum_f D_{if}^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \quad (15)$$

где  $D_{if} = \langle \Psi_i | \vec{r} | \Psi_f \rangle$  - дипольный момент перехода,  $\hbar\omega$  - энергия падающего фотона,  $\Psi_f, E_f$  и  $\Psi_i, E_i$  - волновые функции и энергии конечного и начального состояний, соответственно,  $\sigma_0$  - величина, зависящая от параметров среды. На Рис. 8 представлены зависимости сечения фотоионизации от энергии падающего фотона для различных значений расположения примеси вдоль оси  $z$ . Как видно из рисунка, смещение примеси приводит к увеличению значения пороговой частоты, а также к росту высоты пика, до тех пор, пока примесь приближается к середине слоя.

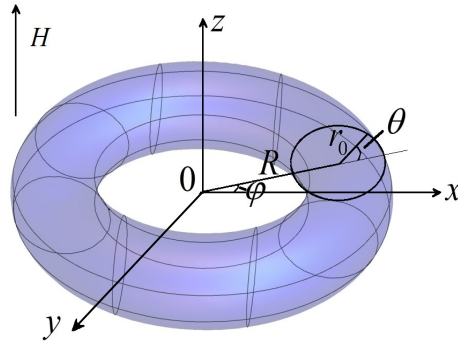
Дальнейшее смещение приведет к его уменьшению. Отметим что нами были рассмотрены переходы из основного состояния примеси в состояния  $1S$  и  $1P$  подзон размерного квантования.



**Рис. 8.** Зависимости сечения фотоионизации от энергии падающего фотона для различных значений  $z_1$  смещения примеси вдоль оси  $Z$ .

**В параграфе 3.4** рассмотрены электронные состояния и оптические свойства КТ, имеющей форму тороида, в отсутствие и при наличии аксиального магнитного поля  $H$ . Задача решается в тороидальных координатах (Рис.9):

$$\begin{aligned} x &= (R + r \cos \theta) \cos \phi; \\ y &= (R + r \cos \theta) \sin \phi; \\ z &= r \sin \theta. \end{aligned} \quad (16)$$

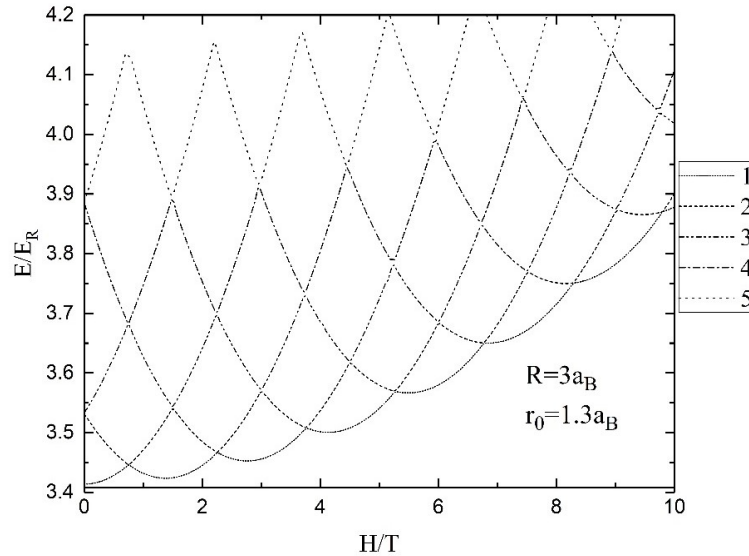


**Рис. 9** Схематический вид тороидальной КТ.

Уравнение Шредингера для электрона в случае наличия аксиального магнитного поля можно записать как:

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{m^2 - 1/4}{(R + r \cos \theta)^2} + m\gamma + \gamma^2 \left( \frac{r^2}{8} + \frac{R^2}{4} + \frac{1}{2} rR \cos \theta + \frac{1}{8} r^2 \cos \theta \right) \right\} \psi_m(r, \theta) - k^2 \psi_m(r, \theta) = 0, \quad (17)$$

где  $k^2 = E$ ,  $\gamma = \frac{\hbar\omega_H}{2E_R} = \frac{ea_B^2}{\hbar c}H$ ,  $\omega_H = \frac{eH}{\mu c}$ . Зависимость энергетических уровней от величины магнитного поля показана на Рис. 10.



**Рис. 10.** Зависимость уровней энергии электрона в тороидальной КТ от напряженности магнитного поля  $H$ .  $R$ ,  $r_0$  - радиус тороида и радиус его поперечного сечения. Уровни пронумерованы в порядке возрастания.

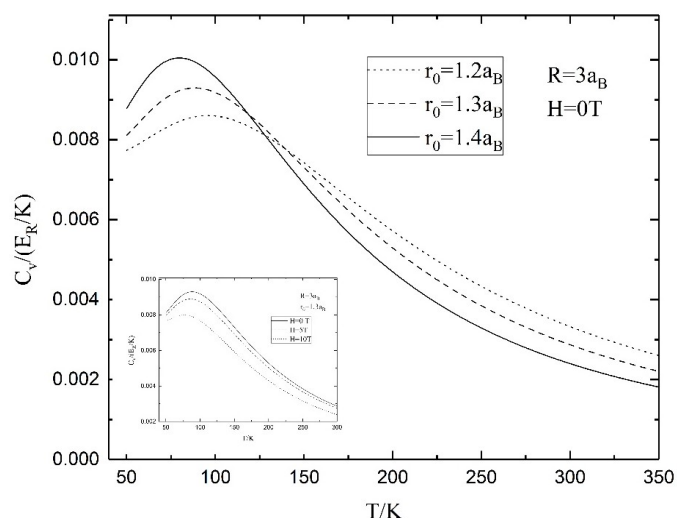
Из него следует, что в системе имеют место осцилляции Ааронова-Бома для одноэлектронных энергетических уровней в тороидальной КТ. Аналогичный эффект обсуждается в работе [15], где собраны экспериментальные данные и получено изменение наклона кривой зависимости энергии электрона от магнитного поля. Это изменение наклона было идентифицировано как индуцированный магнитным полем переход из состояния  $m = 0$  в  $m = -1$ .

**В параграфе 3.5** рассмотрены тепловые и магнитные свойства слабо взаимодействующего электронного газа в тороидальной КТ. Предполагая, что электронный газ подчиняется бoльцмановской статистике, статистическую сумму можно записать следующим образом [16]:

$$Z = \sum_{\nu} \exp(-\beta E_{\nu}), \quad (18)$$

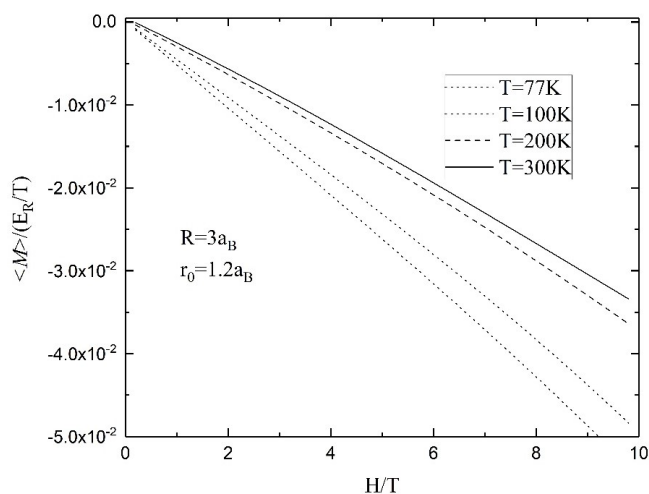
где  $\beta = 1/kT$  - обратная температура,  $\nu$  - набор квантовых чисел. Статистическая сумма может быть рассчитана путем суммирования по всем возможным энергетическим состояниям. С помощью выражения для статистической суммы можно рассчитать термодинамические и магнитные параметры исследуемой системы. Ниже приводятся результаты численных расчетов для структуры GaAs.





**Рис. 11.** Зависимость теплоемкости от температуры для разного радиуса поперечного сечения.

Как следует из Рис. 11, 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 увеличивается вероятность заполнения более высоких уровней, и, следовательно, средняя энергия возрастает, причем ее производная и есть теплоемкость.



**Рис. 12.** Зависимость намагниченности от напряженности магнитного поля при разных значениях температуры.

На Рис. 12 показана зависимость намагниченности от напряженности магнитного поля. Как следует из него, система проявляет ярко выраженный диамагнитный характер. При этом модуль величины намагниченности растет по близкому к линейному закону. Заметим, что с увеличением температуры угол наклона кривой уменьшается.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключении 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 размерного квантования для сферической КТ ядро/оболочка/оболочка с потенциалом ограничения Винтерница-Смородинского. 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 квантовой точке, 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. Выявлено, что слабо взаимодействующий электронный газ, локализованный в тороидальной КТ, проявляет ярко выраженные диамагнитные свойства.

## СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. D. Bimberg, M. Grundmann, and N. Ledentsov. Quantum dot heterostructures. John Wiley & Sons, 1999.
2. Է. Ղազարյան and Ս. Պետրոսյան. Կիսահաղորդչային նանոէլեկտրոնիկայի ֆիզիկական հիմունքները. ՌՀՀ Հրատարակչություն, 2005.
3. 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, 2017.
4. P. Recher, E. Sukhorukov, D. Loss. Quantum dot as spin filter and spin memory. *Phys. Rev. letters*. **9**:1962, 2000.
5. 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, 2017.
6. S. Gustavsson, R. Leturcq, B. Simović, 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, 2006.
7. 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, 2015.
8. T. Wagner, P. Strasberg, J. Bayer, E. Rugeamigabo, T. Brandes, R. Haug. Strong suppression of shot noise in a feedback-controlled single-electron transistor. *Nature nanotechnology* **12**: 218, 2017.
9. D. Huffaker, G. Park, Z. Zou, O. Shchekin, D. Deppe. 1.3  $\mu\text{m}$  room-temperature GaAs-based quantum-dot laser. *Appl. Phys. Lett.* **73**: 2564-2566, 1998.
10. T. Czerniuk, D. Wigger, A. Akimov, C. Schneider, M. Kamp, S. Höfling, D. Yakovlev, T. Kuhn, D. Reiter, M. Bayer. Picosecond control of quantum dot laser emission by coherent phonons. *Phys. Rev. Lett.* **118**: 133901, 2017.
11. 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, 2009.
12. А. Давыдов. *Квантовая механика*, М.: Наука, 1973.
13. 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.
14. K. Moiseev, V. Romanov P. Dement'ev, E. Ivanov. *Journal of Crystal Growth*, **414**:177, 2015.
15. A. Lorke, R. Luyken, A. Govorov, J. Kotthaus, J. Garcia, P. Petroff. Spectroscopy of nanoscopic semiconductor rings. *Phys. Rev. Lett.* **84**: 2223, 2000.
16. J. Elzerman, R. Hanson, J. Greidanus, L. Beveren, S. De Franceschi, L. Vandersypen, S. Tarucha, L. Kouwenhoven. *Physical Review B*, **67**:161308, 2003.

## 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**: 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.

### Ամփոփագիր

Քվանտային կետերը (ՔԿ) համարվում են խոստումնալից թեկնածուներ նոր սերնդի սարքերում օգտագործման համար: Հատկանշական է, որ ՔԿ-ում լիցքակիրների էներգիական մակարդակների ճկուն դեկավարման հնարավորությունը թույլ է տալիս ստանալ նախապես որոշված ֆիզիկական բնութագրեր ունեցող կառուցվածքներ: Տարբեր երկրաչափական ձևերի ՔԿ-երի էլեկտրոնային, փոխանակման, օպտիկական և ջերմադինամիկ բնութագրերի ուսումնասիրությունը շարունակում է մնալ տեսական նանոֆիզիկայի արդիական խնդիր:

Ներկայացվող ատենախոսությունը նվիրված է ՔԿ-երի էլեկտրոնային, փոխանակային, օպտիկական և ջերմադինամիկ հատկությունների ուսումնասիրությանը:

## Հիմնական արդյունքները

1. Դիտարկվել է գնդաձև պարաբոլական ՔԿ-ում երկու էլեկտրոնի խնդիրը՝ խառնուկային ատոմի և առկայության, և բացակայության դեպքում: Ուսումնասիրվել է այսպիսի կառուցվածքների էներգիական սպեկտրը և Հայգենբերգի անորոշությունների առնչության հիման վրա տրվել է համակարգի էներգիայի գնահատականը: Հաշվի առնելով էլեկտրոնների սպինները՝ հաշվարկվել է փոխանակային ինտեգրալը, ինչպես նաև վիճակների փոխանակման ժամանակի կախվածությունը ՔԿ-ի շառավղից: Ցույց է տրվել, որ խառնուկի բացակայության դեպքում այդ կախվածությունը ունի գծային բնույթ:
2. Ուսումնասիրվել են զուգահեռանիստի ձևով քվանտային գծիկի էլեկտրոնի էներգիական սպեկտրի առանձնահատկությունները: Հայտնաբերվել են եռակի այլասերված էներգիական մակարդակների այն ընտանիքները, որոնք բնութագրվում են սպինորների  $\Gamma(2)$  մոդուլային խմբով: Բացի դրանից, ցույց է տրվել, որ եռակի այլասերված մակարդակների հիմքում ընկած են Պյութագորասի եռյակները: Հետազոտվել են միջգոտիական օպտիկական անցումները բարակ քվանտային գծիկների անսամբլում: Ցույց է տրվել, որ, հաշվի առնելով ջոկման կանոնները, էլեկտրոնային անցումների համար կարելի է «վիզուալացնել» Պյութագորասի եռյակները:
3. Վինտերնից-Սմորոդինսկու պոտենցիալով քվանտային նանոշերտում ուժեղ ՔԿ-ում միջին քվանտացման ռեժիմների համար հետազոտվել են միջգոտիական կլանումը: Հետազոտվել են քվանտային նանոշերտում կենտրոնից շեղված խառնուկային վիճակի օպտիկական հատկությունները: Դուրս է բերվել ֆոտոիոնիզացիայի լայնական հատույթի կախվածությունը ֆոտոնի էներգիայից, խառնուկի դիրքից, ինչպես նաև նանոշերտի երկրաչափական պարամետրերից:
4. Ուսումնասիրվել են տորոիդալ ՔԿ-ում տեղայնացված թույլ փոխազդող էլեկտրոնային գազի դիամագնիսական հատկությունները: Հաշվարկվել են միջին էներգիայի, միջին մագնիսացվածության ՔԿ-ում միջին մագնիսական ընկալունակության կախվածությունները մագնիսական դաշտի արժեքից: Ստացվել են նաև կլանման գործակիցների կախվածությունը ֆոտոնի էներգիայից:

## SUMMARY

To date, quantum dots (QDs) are considered as promising candidates for the components of the new generation devices. It is noteworthy that the possibility of flexible manipulation of the energy levels of charge carriers in a QD makes it possible to obtain structures with predefined physical characteristics. The study of electronic, exchange, optical and thermodynamic characteristics of zero-dimensional structures of various geometric forms continue to be an important problem of modern theoretical nanophysics.

The presented dissertation is devoted to the investigation of electronic, optical and magnetic properties of QDs.

### Main results

1. The problem of two electrons in a spherical QD with a parabolic confinement potential is considered in both cases of the absence and presence of an impurity in the center of the QD. The energy spectrum of such structures and the estimation based on the Heisenberg uncertainty relations are studied. The exchange integral was calculated, as well as the dependence of the state exchange time on the radius of the QD taking into account the spins of the electrons. It has been shown that, in the absence of an impurity, the dependence of the state exchange time between electrons on the QD radius is near to linear. The saturating behavior of the dependence of the exchange time of states on the radius of the QD in the case of the presence of an impurity is revealed.
2. The particularity of the electron energy spectrum in a parallelepiped shaped quantum dash has been investigated. The family of the triply degenerate energy levels characterized by modular group  $\Gamma(2)$  has been found. In addition, it has been discovered that primitive Pythagorean triples are in the basis of every family of triply degenerate levels. The interband optical transitions in this system have been investigated, and it has been shown that due to the selection rules for the electronic transitions it is possible to "visualize" Pythagorean triples.
3. The dependences of the interband absorption coefficient and photoluminescence intensity on the energy of the incident photon in the strong and intermediate size quantization regimes for a spherical core/shell/shell QD with Winternits-Smorodinsky confinement potential were obtained. In the framework of the variational method, a spherical nanolayer with an off-center impurity has been investigated. Dependences of the photoionization spectra on the impurity position and the dimensions of the QD are obtained.
4. The dependences of the electron energy in a quantum dot having the shape of a toroid are obtained, on dimensions of QD, and also on the magnitude of the magnetic field. Dependences of the absorption coefficient on the photon energy were also obtained. The thermodynamic and magnetic properties of a weakly interacting electron gas in a quantum dot having the shape of a toroid are considered. The dependences of the average energy, heat capacity, and entropy of a weakly interacting electron gas on temperature, as well as magnetization and magnetic susceptibility on the magnetic field intensity are obtained.