

ՀՀ ԿՐԹՈՒԹՅԱՆ, ԳԻՏՈՒԹՅԱՆ, ՄՇԱԿՈՒՅԹԻ ԵՎ ՄՊՈՐՏԻՆԱԽԱՐԱՐ ՈՒԹՅՈՒՆ
ԵՐԵՎԱՆԻ ՊԵՏԱԿԱՆ ՀԱՄԱԼՍԱՐԱՆ

ԽԱՉԱՏՐՅԱՆ ԽԱՉԻԿ ՍՈՒՐԵՆԻ

Կ ՈՆԱԿԱՆ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԿԵՏԵՐԻ ԷԼԵԿՏՐՈՆԱՅԻՆ ԵՎ ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ
ՀԱՍԿՈՒԹՅ ՈՒՆՆԵՐԻ ՈՒՍՈՒՄՆԱՄԻՐ ՈՒՄՇ

Ա.04.10 – «Կլասիկադրոդիչների ֆիզիկա» մասնագիտությամբ
ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների թեկնածուի գիտական սատիճանի
հայցման ատենախոսություն

Ս Ե Ղ Մ Ա Գ Ի Ր

ԵՐԵՎԱՆ – 2021

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ, НАУКИ, КУЛЬТУРЫ И СПОРТА РА
ЕРЕВАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ХАЧАТРЯН ХАЧИК СУРЕНОВИЧ

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
КОНИЧЕСКИХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

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 – 2021

Ատենախոսության թեման հաստատվել է Հայ-Ռուսական համալսարանում

Գիտական ղեկավար՝ Ֆիզ.-մաթ. գիտ. դոկտոր, պրոֆեսոր, ՀՀ ԳԱԱ
ակադեմիկոս, Է.Մ.Ղազարյան


Պաշտոնական
ընդդիմախոսներ՝ Ֆիզ.-մաթ. գիտ. դոկտոր, պրոֆեսոր Կ.Մ. Ղամբարյան
Ֆիզ.-մաթ. գիտ. դոկտոր, պրոֆեսոր Կ.Հ. Ահարոնյան

Առաջատար՝ ՀՀ ԳԱԱ ֆիզիկական
կազմակերպություն՝ հետազոտությունների ինստիտուտ

Ատենախոսության պաշտպանությունը տեղի կունենա 2022թ. հունվարի
22-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 առաքված է 2021թ. դեկտեմբերի 10-ին

Մասնագիտական խորհրդի
գիտական քարտուղար՝  Ֆիզ.մաթ. գիտ. թեկնածու, դոցենտ
Վ.Պ. Քալանթարյան

Тема диссертации утверждена в Российско-Армянском университете

Научный руководитель: доктор физ.-мат. наук, профессор, академик
НАН РА Э.М. Казарян

Официальные оппоненты: доктор физ.-мат. наук, профессор К.М. Гамбарян
доктор физ.-мат. наук, профессор К.Г. Агаронян

Ведущая организация: Институт физических исследований НАН РА

Защита диссертации состоится 22-го января 2022г. 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 10 декабря 2021г.

Ученый секретарь
специализированного совета՝  кандидат физ.-мат. наук, доцент
В.П. Калантарян

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность исследования

Полупроводниковые квантовые точки (КТ) - это уникальные системы, в которых энергетический спектр носителей заряда полностью квантован [1-4]. В этом отношении КТ похожи на атомные системы, но в отличие от реальных атомов, энергетический спектр носителей заряда в КТ можно управляемым образом контролировать, изменяя геометрическую форму и размеры КТ [5-8].

Благодаря современным методам выращивания уже выращены сферические, эллипсоидальные, пирамидальные и другие геометрические формы КТ, свойства которых всесторонне изучены как теоретически, так и экспериментально [9-10]. Совсем недавно были реализованы конические КТ (ККТ), которые рассматриваются как перспективные кандидаты для элементной базы приборов нового поколения. Учитывая тот факт, что геометрия ККТ нетривиальна, для теоретического описания физических процессов, протекающих в таких системах, необходимо использование специальных математических подходов и приближений [11-13]. С другой стороны, как показано в работах [14-15], применение адиабатического приближения является эффективным способом описания ККТ, благодаря которому можно успешно описывать сильно сплюснутые и сильно вытянутые ККТ. Адиабатическое приближение дает возможность получить аналитические формы волновых функций и энергетического спектра электронов, что позволяет всесторонне изучать различные физические характеристики таких систем, в частности оптические.

Резюмируя, можно сказать, что исследование электронных и оптических свойств нульмерных наноструктур различных геометрических форм продолжает оставаться актуальной задачей современной теоретической нанопластики. Именно этим вопросам посвящена данная диссертационная работа.

Цель работы

Целью диссертационной работы является:

- теоретическое исследование межзонного оптического поглощения в ансамбле сильно вытянутых ККТ при наличии аксиального электрического поля.
- исследование внутрizonного нелинейного поглощения в сильно вытянутой ККТ при наличии аксиального электрического поля.
- исследование межзонного оптического поглощения в ансамбле сильно сплюснутых ККТ при наличии радиального электрического поля.
- исследование двухэлектронных состояний в рамках теории возмущений, изучение двухэлектронных состояний в квазиконической КТ.
- изучение дивалентных примесных состояний в квазиконической КТ.

Научная новизна

1. Исследовано влияние электрического поля на характер линейного и нелинейного поглощений в сильно вытянутой ККТ.
2. Исследован характер межзонного оптического поглощения в сильно сплюснутой ККТ при наличии радиального электрического поля.

3. В рамках теории возмущений, по аналогии с теорией атома гелия, изучены двухэлектронные состояния в квазиконической КТ.
4. В рамках теории возмущений построена теория дивалентных примесных состояний в предположении, что примесь локализована в вершине квазиконической КТ.

Научная и практическая ценность

Полученные в диссертации результаты, помимо академического интереса, имеют также практическое значение. На сегодняшний день КТ рассматриваются в качестве перспективных кандидатов на роль элементной базы для приборов нового поколения. В частности, низкотемпературные лазеры, светодиоды на основе 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. При межзонном электропоглощении в сильно вытянутой ККТ порог поглощения испытывает красное смещение с ростом электрического поля.
2. При наложении радиального электрического поля на сильно сплюснутую ККТ порог поглощения испытывает красное смещение с ростом электрического поля и появляются новые правила отбора по магнитному и аксиальному квантовому числу, характеризуемые равенством $m \rightarrow m' \pm 1, n_z \rightarrow n'_z$.
3. С увеличением геометрических размеров квазиконической КТ время обмена состояниями между электронами увеличивается, при этом время обмена состояниями более чувствительно к изменению углового раствора квазиконической КТ.

Апробация работы. Основные результаты, полученные в данной диссертационной работе, обсуждались во время научных семинаров кафедры Общей физики и квантовых наноструктур Инженерно-физического института РАУ, а также докладывались на следующих научных конференциях:

- 14-я Годичная научная конференция, РАУ (Ереван, РА, 2019).
- International Youth Conference on Electronics, Telecommunications and Information Technologies, SPBSTU (Санкт-Петербург, РФ, 2020).
- Young scientists Conference "Physics of Nanostructures", RAU (Ереван, РА, 2020).
- International Youth Conference on Electronics, Telecommunications and Information Technologies, SPBSTU (Санкт-Петербург, РФ, 2021).
- Joint International Conference on Astrophysics for Young Scientists, Buurakan (Бюракан, РА, 2021).
- XXIII Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике (Санкт-Петербург, РФ, 2021).
- 15-я Годичная научная конференция, РАУ (Ереван, РА, 2019).

Публикации. По теме диссертации опубликованы 3 работы. Список приводится в конце автореферата.

Структура и объем работы Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка используемой литературы. Текст изложен на 101 страницах и содержит 48 рисунков, 4 таблиц и 111 наименований литературы.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении представлен обзор научной литературы по теме диссертационной работы. Приведена информация об основных квантовомеханических методах описания наноструктур. Сформулированы цели диссертации и приведены ее основные положения.

Первая глава диссертационной работы посвящена изучению линейным и нелинейным оптическим электропоглощениям в сильно вытянутых ККТ во внешнем аксиальном электрическом поле.

В параграфе 1.1 приведен обзор литературы, посвященный изучению оптическим и электрическим эффектам в сильно вытянутых ККТ.

В параграфе 1.2 рассматриваются электронные состояния в сильно вытянутой

ККТ с радиусом сечения $\rho(z) = (H - z) \tan \theta = R_0 \left(1 - \frac{z}{H}\right)$ в плоскости oZ , где R_0

- радиус основания конуса, H - высота конуса ($R_0 \ll H$). Рассматриваемая система находится во внешнем аксиальном электрическом поле $\vec{\varepsilon}$. Так как радиус основания ККТ намного меньше, чем ее высота, систему можно описать в рамках адиабатического приближения, согласно которому гамильтониан системы можно представить как сумму гамильтонианов “быстрой” и “медленной” подсистем. Ясно, что “быстрая” подсистема находится в радиальной плоскости, а “медленная” - в аксиальной. Полная волновая функция системы искалась в виде:

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} f(\rho, z) \chi(z), \quad (1)$$

где $f(\rho, z)$ - радиальная волновая функция, которая содержит координату z “медленной” подсистемы в качестве параметра, $\chi(z)$ - волновая функция “медленной” подсистемы, описывающая движение вдоль оси oZ , m - магнитное квантовое число.

В адиабатическом методе энергия “быстрой” подсистемы играет роль эффективной потенциальной энергии для “медленной”. Другими словами, можем записать:

$$E_{n_p, m}(z) = U_{eff}^{n_p, m}(z) = \frac{\hbar^2 \lambda_{n_p, m}^2}{2\mu R_0^2 \left(1 - \frac{z}{H}\right)^2}, \quad (2)$$

$$E_n^z = \frac{\hbar^2 \lambda_{1,0}^2}{2\mu R_0^2} \left[\frac{1}{\left(1 - \frac{Z_0}{H}\right)^2} - \frac{2\frac{Z_0}{H}}{\left(1 - \frac{Z_0}{H}\right)^3} \right] - \left(\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\hbar^2 \lambda_{1,0}^2}{\mu R_0^2 H \left(1 - \frac{Z_0}{H}\right)^3} - e\varepsilon \right] \right)^{\frac{1}{2}} \cdot a_{n+1}$$

В параграфе 1.3 показаны зависимости коэффициента межзонного поглощения от энергии падающего света. Поглощение рассмотрено в режиме сильного размерного квантования, когда кулоновским взаимодействием между электроном и дыркой можно пренебречь.

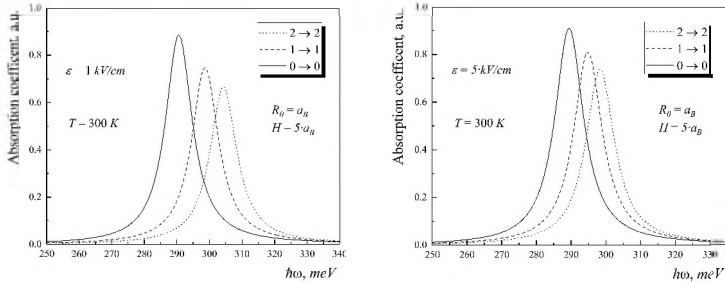


Рис. 1. Зависимости коэффициента поглощения от энергии падающего света для диагональных переходов легких дырок в зону проводимости.

На Рис. 1 представлены зависимости коэффициента линейного поглощения от энергии падающего света при наличии внешнего электрического поля. Прежде всего, следует отметить, что с увеличением квантовых чисел интенсивность линейного поглощения уменьшается в случае диагональных переходов. Увеличение электрического поля в данном случае приводит к сближению кривых поглощения и к красному смещению пиков поглощения.

В параграфе 1.4. основываясь на задаче сильно вытянутой ККТ, изучен коэффициент поглощения ансамбля ККТ. Исходя из задачи, решенной в параграфе 1.2, можно убедиться, что правила отбора имеют следующий вид

$$m \rightarrow -m', \quad n_p \rightarrow n'_p. \quad (3)$$

Заметим, что аксиальное электрическое поле снимает правила отбора по квантовому числу n_z .

В процессе выращивания ансамбля КТ, в зависимости от технологических параметров роста, может происходить симметричное или асимметричное распределение геометрических параметров КТ около определенных средних значений. Для описания симметричного распределения радиуса основания параметра ККТ вокруг среднего значения \bar{R}_0 воспользуемся функцией распределения Гаусса.

На Рис. 2 показаны зависимости коэффициента поглощения в ансамбле из ККТ от энергии падающего света для случая функции распределения Гаусса. С увеличением электрического поля максимум поглощения смещается в сторону меньшей энергии падающего света в случае легких дырок (Рис. 2 (слева)). Это связано с тем, что по мере увеличения электрического поля уровни энергии для электрона и дырки приближаются, тем самым уменьшая эффективный край поглощения. Как видно из Рис. 2 (справа), спектр поглощения для случая тяжелых дырок практически не зависит от приложенного электрического поля. В этом

случае искривление энергетических уровней тяжелых дырок не оказывает существенного влияния на край поглощения.

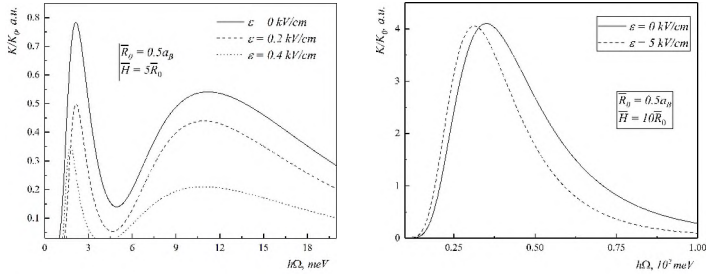


Рис. 2. Зависимости коэффициента поглощения ансамбля сильно вытянутых ККТ от частоты падающего света, для различных значений электрического поля (переходы между зонами легких дырок (слева) (тяжелых дырок (справа)) и проводимости)

В параграфе 1.5 рассматривается прямое внутрizonное поглощение света в сильно вытянутой ККТ с вышепомянутым потенциалом ограничения во внешнем электрическом поле.

На Рис. 3 представлены зависимости коэффициента линейного, нелинейного и полного поглощения от энергии падающего света во внешнем поле для различных $|m, n_r, n_z\rangle \rightarrow |m', n'_r, n'_z\rangle$ переходов. Поскольку коэффициент нелинейного поглощения имеет знак, противоположный линейному, полное поглощение будет уменьшаться. Как видно из Рис. 3, увеличение квантовых чисел приводит к спаду как линейного, так и нелинейного поглощений, так как вероятность нахождения электрона на данном уровне уменьшается. При увеличении квантовых чисел мы практически не наблюдаем нелинейных эффектов.

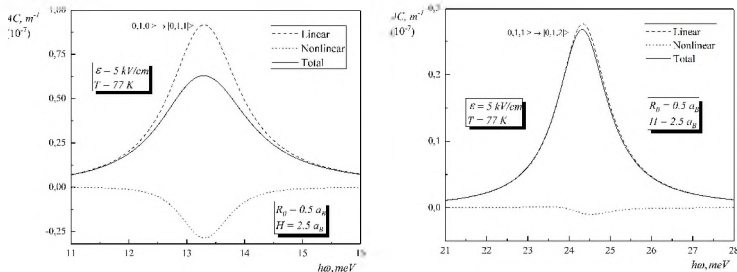


Рис. 3. Зависимости линейного, нелинейного и полного коэффициента поглощения от энергии падающего света для разных переходов при $T = 77 K$.

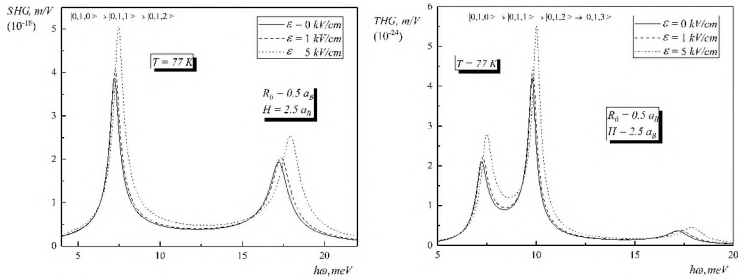


Рис. 4. Зависимости коэффициентов генераций второй (слева) и третьей (справа) гармоники от энергии падающего света.

Как видно из Рис.4, пики коэффициента генерации второй гармоники увеличиваются с увеличением электрического поля. Происходит это из-за смещения зоны проводимости под действием электрического поля.

Вторая глава диссертации посвящена изучению межзонного электропоглощения в сильно сплюснутых ККТ.

В параграфе 2.1 приведен обзор литературы, посвященный изучению оптическим и электрическим эффектам в сильно сплюснутых ККТ.

В параграфе 2.2 рассматривается геометрия сильно сплюснутой ККТ, при этом, действие электрического поля рассматривается в радиальном направлении. Ограничивающий потенциал КТ снова рассматривается непроницаемым. В данном случае, при использовании адиабатического приближения, роль “быстрой” подсистемы играет движение вдоль оси Z . Соответственно, в радиальном направлении имеем “медленную” подсистему.

Соответствующие выражения для энергии и волновой функции “быстрой” подсистемы будут иметь следующий вид:

$$E_n^z(\rho) = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2\mu(R_0 - \rho)^2 \text{tg}^2 \theta},$$

$$\chi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{H \left(1 - \frac{\rho}{R_0}\right)}} \sin \frac{\pi n \cdot z}{H \left(1 - \frac{\rho}{R_0}\right)}. \quad (4)$$

В рамках теории возмущений были получены первая и вторая поправки к энергии “медленной” подсистемы. Исходя из этого, выражения для энергии и волновой функции “медленной” подсистемы запишутся в следующем виде:

$$\Phi_{n_\rho, m} = f_0^{(n_\rho, m)}(\rho) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} - e\epsilon R_0 \sum_{n_\rho} \frac{1}{J_{m+1}(\lambda_{n_\rho, m})} (T_1 + T_2), \quad (5)$$

$$E_{tot\ n_p, m}^{(0)} = \frac{\hbar^2 \lambda_{n_p, m}^2}{2\mu R_0^2} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu H^2}, \quad \begin{cases} \Delta E_{n_p, m}^{(1)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu H^2} \frac{4F_{n_p, m}}{J_{m+1}^2(\lambda_{n_p, m}) \cdot \lambda_{n_p, m}^3}, \\ \Delta E_{n_p, m}^{(2)} = (e\epsilon R)^2 \sum_{n_p} (\Upsilon_1 + \Upsilon_2) \end{cases} \quad (6)$$

С учетом возмущенной части волновой функции, для межзонных оптических переходов получаем следующие правила отбора:

$$\begin{cases} m \rightarrow -m', m \rightarrow m' \pm 1 \\ n_p \rightarrow n_p', n_z \rightarrow n_z' \end{cases} \quad (7)$$

Отметим, что влияние возмущения добавляет недиагональные переходы для магнитного квантового числа m , а также появляются новые правила отбора по аксиальному квантовому числу n_z .

В параграфе 2.3, по аналогии со случаем сильно вытянутой ККТ, рассматривается межзонное электропоглощение в сильно сплюснутой ККТ в режиме сильного квантования.

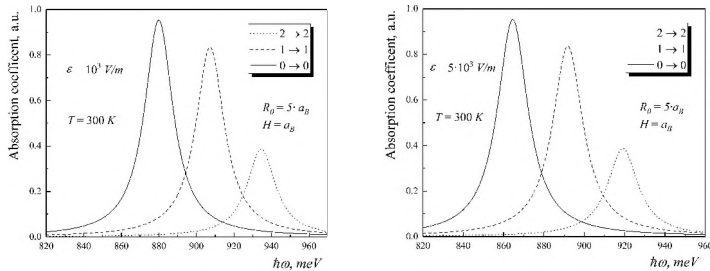


Рис. 5. Зависимости коэффициента поглощения от энергии падающего света, для диагональных переходов легких (слева) и тяжелых (справа) дырок в электронные состояния.

Из Рис. 5 следует, что с увеличением квантовых чисел интенсивность линейного поглощения уменьшается, так как увеличивается эффективная запрещенная зона. Наличие электрического поля в данном случае приводит к красному смещению пиков поглощения, так как эффективная запрещенная зона уменьшается вследствие искривления зоны проводимости и валентной зоны. Величина смещения увеличивается с ростом электрического поля.

В параграфе 2.4 изучены эффекты ансамбля сильно сплюснутых ККТ.

На Рис. 6 показаны зависимости коэффициента поглощения от энергии падающего света для случая распределения Гаусса. Можно заметить, что с увеличением электрического поля максимум поглощения смещается в сторону меньшей энергии падающего света в случае легких дырок. Это связано с тем, что по мере увеличения электрического поля уровни энергии для электрона и дырки приближаются, тем самым уменьшая эффективный край поглощения. Спектр

поглощения для случая тяжелых дырок практически не зависит от приложенного электрического поля, что аналогично случаю сильно вытянутой ККТ.

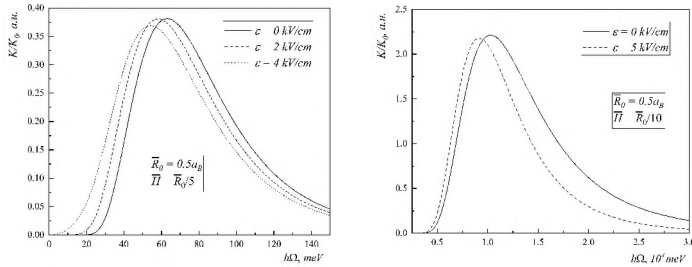


Рис. 6. Зависимости коэффициента поглощения ансамбля сильно сплюснутых ККТ от частоты падающего света, для различных значений электрического поля (переходы между зонами легких дырок (слева) (тяжелых дырок (справа)) и проводимости).

Третья глава диссертационной работы посвящена исследованию двухэлектронных состояний в квазиконической КТ в рамках теории возмущений, а также изучению дивалентных примесных состояний в квазиконической КТ.

В параграфе 3.1 представлено введение в третью главу и дан обзор литературы, посвященный исследованиям несколько частичных и многочастичных комплексов в полупроводниковых КТ.

В параграфе 3.2 представлена задача о поведении двухэлектронных состояний в квазиконической КТ, где ограничивающий потенциал в радиальном и угловом направлениях выбран бесконечным.

Для волновых функций в угловом и радиальном направлениях имеем следующие выражения:

$$\begin{cases} m \geq 0, & P(\theta) = C \sin^m \frac{\theta}{2} \cos^m \frac{\theta}{2} {}_2F_1\left(m+l+1, m-l, m+1, \sin^2 \frac{\theta}{2}\right) \\ m < 0, & P(\theta) = C \sin^{-m} \frac{\theta}{2} \cos^m \frac{\theta}{2} {}_2F_1\left(l+1, -l, 1-m, \sin^2 \frac{\theta}{2}\right) \end{cases}, \quad (8)$$

$$R(r) = D \frac{1}{\sqrt{r}} J_{l+\frac{1}{2}} \left(\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}} r \right), \quad (9)$$

где ${}_2F_1$ - гипергеометрическая функция, $J_{l+\frac{1}{2}}$ - функция Бесселя, $m = 0; \pm 1; \pm 2, \dots$

- магнитное квантовое число, $k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$ и l - аналоги квантовых чисел, описывающих радиальное и орбитальное движения электрона, соответственно. Следует отметить, что в данном случае l это не целое число, как в случае движения в сферически-симметричных полях, где $l = 0; 1; 2, \dots$

Отметим, что в расчетах мы сосредоточились на первых двух состояниях одночастичной задачи (основное и первое возбужденное состояние).

Принимая во внимание приближение Рассела-Саундерса, когда полная волновая функция рассматривается как произведение координатной и спиновой частей, мы обсуждаем двухэлектронные состояния в рамках теории атома гелия, рассматривая кулоновское взаимодействие между электронами как возмущение. По аналогии с атомом гелия волновые функции и энергетические состояния для синглетного и триплетного состояний можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned}\Psi_{\text{singlet}} &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(r_1, \theta_1, \varphi_1) \psi_2(r_2, \theta_2, \varphi_2) + \psi_2(r_1, \theta_1, \varphi_1) \psi_1(r_2, \theta_2, \varphi_2)] \chi_a(\sigma_1, \sigma_2), \\ \Psi_{\text{triplet}} &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(r_1, \theta_1, \varphi_1) \psi_2(r_2, \theta_2, \varphi_2) - \psi_2(r_1, \theta_1, \varphi_1) \psi_1(r_2, \theta_2, \varphi_2)] \chi_s(\sigma_1, \sigma_2), \\ E_{\text{singlet}} &= E_1 + E_2 + K + P, \\ E_{\text{triplet}} &= E_1 + E_2 + K - P,\end{aligned}\quad (11)$$

где $\psi_1(r_1, \theta_1, \varphi_1)$, $\psi_1(r_2, \theta_2, \varphi_2)$ - волновая функция первой частицы в первом и втором состояниях, соответственно, $\psi_2(r_2, \theta_2, \varphi_2)$, $\psi_2(r_1, \theta_1, \varphi_1)$ - волновая функция второй частицы во втором и первом состояниях, соответственно, $\chi_a(\sigma_1, \sigma_2)$ - спиновая волновая функция, E_1, E_2 - энергии первой и второй частиц, соответственно, K - энергетическая поправка кулоновского взаимодействия и P - энергия обменного взаимодействия.

В параграфе 3.3 изучены кулоновская и обменная поправки к энергетическим уровням. Следует отметить, что в расчетах относительный угол θ между частицами был учтен. Следовательно, для K и P имеем следующие интегралы:

$$\begin{aligned}K &= \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_0^{\theta_0} \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_{-\theta_0}^{\theta_0} \frac{\Psi_{01}^* \Psi_{01} \cdot \sin \theta_1 d\theta_1 d\varphi_1 r_1^2 dr_1 \cdot \sin \theta_2 d\theta_2 d\varphi_2 r_2^2 dr_2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 (\cos \theta_1 \cos \theta_2 + \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2))}}, \\ P &= \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_0^{\theta_0} \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_{-\theta_0}^{\theta_0} \frac{\Psi_{01}^* \Psi_{02} \cdot \sin \theta_1 d\theta_1 d\varphi_1 r_1^2 dr_1 \cdot \sin \theta_2 d\theta_2 d\varphi_2 r_2^2 dr_2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 (\cos \theta_1 \cos \theta_2 + \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2))}}.\end{aligned}\quad (12)$$

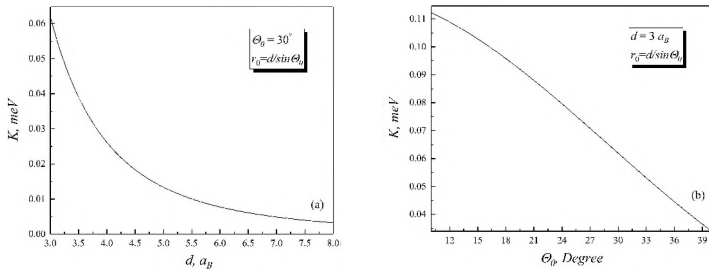


Рис. 7. Зависимости энергетической поправки кулоновского взаимодействия от радиуса основания (а) и от угла раствора (б) квазиконической КТ.

Как видно из Рис. 7, с увеличением геометрического параметра квазиконической КТ кулоновское взаимодействие ослабевает. Это можно объяснить тем, что с увеличением геометрического параметра квазиконической КТ увеличивается область локализации электронов, из-за чего они располагаются на большем расстоянии друг от друга из-за отталкивания. В связи с этим, это приводит к монотонному убыванию кулоновской поправки. Стоит отметить, что энергия взаимодействия электронов более чувствительна к изменению угла раствора квазиконуса.

В параграфе 3.4 рассматривается обмен состояниями электронов за определенное время. Приведенное ниже выражение описывает время, необходимое для перехода системы из состояния $\Psi_{01} = \psi_1(r_1, \theta_1, \varphi_1)\psi_2(r_2, \theta_2, \varphi_2)$ в состояние $\Psi_{02} = \psi_1(r_2, \theta_2, \varphi_2)\psi_2(r_1, \theta_1, \varphi_1)$:

$$\tau = \frac{\pi\hbar}{2P}. \quad (13)$$

Зависимости обменной энергии от радиуса d и угла раствора θ_0 квазиконической КТ показаны на Рис. 8 (а) и Рис. 8 (б) соответственно.

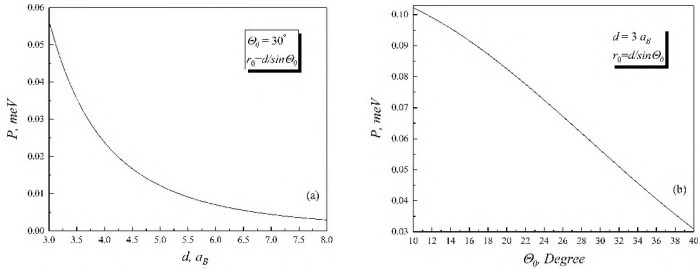


Рис. 8. Зависимости обменной энергии P от радиуса основания и угла раствора квазиконической КТ.

Поведение зависимостей на Рис. 8 схожи со случаем зависимостей кулоновского взаимодействия, приведенных в предыдущем параграфе. Обменное взаимодействие обусловлено степенью перекрытия волновых функций электронов, локализованных в КТ. Понятно, что перекрытие волновых функций уменьшается с увеличением размеров КТ и расстояния между электронами, что приводит к снижению энергии обменного взаимодействия.

На Рис. 9 показаны зависимости времени обмена состояниями от геометрических размеров рассматриваемой квазиконической КТ. Из рисунков следует, что зависимости имеют противоположный обменной энергии характер, т.е. время обмена увеличивается с увеличением радиуса и угла раствора квазиконического КТ.

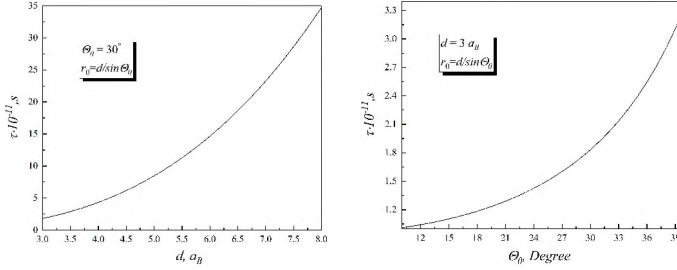


Рис. 9. Зависимости времени обмена электронов τ от геометрических размеров квазиконической КТ.

В параграфе 3.5 рассматривается случай, когда помимо двух электронов, в вершине квазиконической КТ находится примесь.

Угловая часть $P(\theta)$ не зависит от донора, ее решения имеют вид (8). Для уравнения радиальной волновой функции $R(r)$ получим:

$$\frac{dR(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} \left(\frac{Ze^2}{\epsilon r} + E \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) = 0. \quad (14)$$

Решения уравнения (14) известны, и имеют следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} E > 0, \quad R(r) = \frac{1}{\alpha_1 r} e^{i\alpha_1 r} (\alpha_1 r)^{l+1} {}_1F_1(l+1-i\eta, 2l+2, 2i\alpha_1 r), \\ E < 0, \quad R(r) = \frac{1}{\alpha_2 r} e^{-\frac{\alpha_2 r}{2}} (\alpha_2 r)^{l+1} {}_1F_1(l+1-\lambda, 2l+2, \alpha_2 r), \\ E = 0, \quad R(r) = r^{-\frac{1}{2}} J_1 \left[\left(\frac{8\mu Ze^2}{\epsilon_d \hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} r^{\frac{1}{2}} \right], \quad l = 0, \end{array} \right. \quad (15)$$

где $\alpha_1^2 = -\frac{2\mu E}{\hbar^2}$, $\alpha_2^2 = -\frac{8\mu E}{\hbar^2}$, $\eta = -\frac{\mu Ze^2}{\epsilon_d \hbar^2 \alpha_1}$, $\lambda = \frac{2\mu Ze^2}{\epsilon_d \hbar^2 \alpha_2}$, $J_1(x)$ - функция

Бесселя первого рода.

Для данной задачи мы опять принимаем во внимание приближение Рассела-Саундерса, и рассматриваем полную волновую функцию как произведение координатной и спиновой частей.

В параграфе 3.6 по аналогии с вычислениями, сделанными в параграфе 3.3, были вычислены кулоновская поправка к уровням энергии дивалентной примеси в квазиконической КТ.

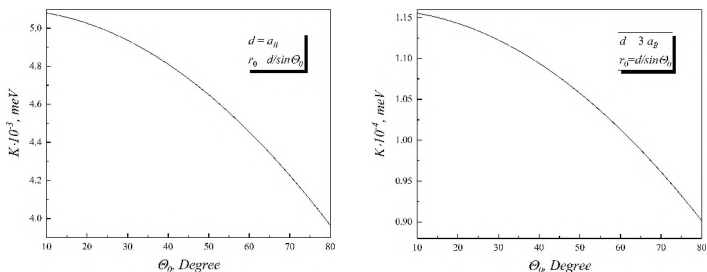


Рис. 10. Зависимости энергетической поправки кулоновского взаимодействия от угла раствора квазиконической КТ в присутствии примеси при разных значениях d .

Зависимости на Рис. 10 повторяют поведение графиков для случая квазиконической КТ без примеси.

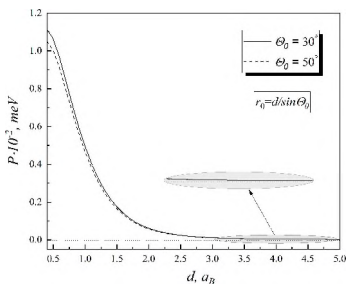


Рис. 11. Зависимость энергетической поправки кулоновского взаимодействия от радиуса основания квазиконической КТ в присутствии примеси при различных θ_0 .

Как видно из Рис. 11, с увеличением радиуса основания энергия кулоновской поправки монотонно уменьшается, и начиная с некоторого значения для радиуса уходит в область насыщения. Это можно объяснить тем, что при относительно больших значениях радиуса основания локализация электронов практически не меняется, так как электроны удерживаются донорной примесью.

В параграфе 3.7 рассчитаны зависимости обменной энергии от геометрических параметров квазиконической КТ в присутствии примеси. Ниже представлены полученные результаты.

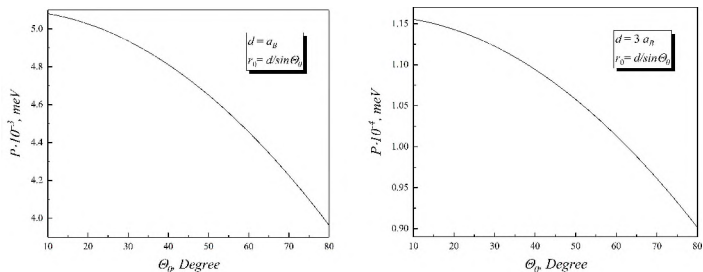


Рис. 12. Зависимости обменной энергии P от угла раствора квазиконической КТ в присутствии примеси, при различных значениях d .

Поведения зависимостей на Рис. 12 такие же, как и в случае кулоновского взаимодействия. Увеличение угла раствора квазиконической КТ приводит к снижению обменного взаимодействия, из-за уменьшения перекрытия волновых функций электронов.

Зависимости времени обмена состояниями от угла раствора квазиконической КТ в присутствии примеси представлены на Рис. 13.

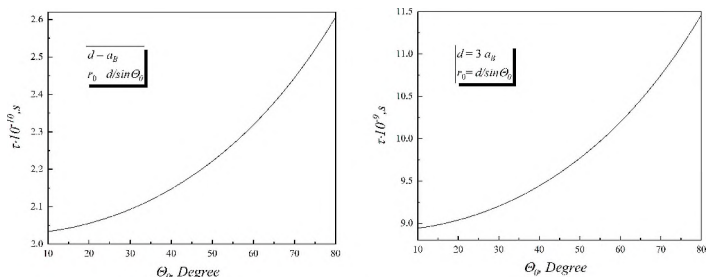


Рис. 13. Зависимости времени обмена электронов τ от угла раствора квазиконической КТ в присутствии примеси, при различных значениях d .

Как видно из Рис. 13, с увеличением угла раствора квазиконической КТ время обмена состояниями увеличивается, так как уменьшается перекрытие волновых функций, вследствие чего уменьшается обменное взаимодействие. С увеличением угла раствора квазиконической КТ электроны "чувствуют" друг друга слабее и обмен состояниями становится маловероятным.

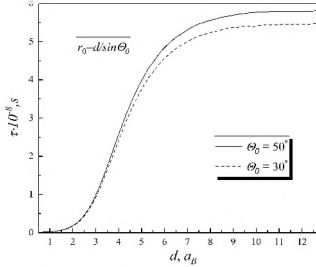


Рис. 14. Зависимость времени обмена электронами τ от радиуса основания квазиконической КТ в присутствии примеси.

Из Рис. 14 видно, что имеет место принципиальное отличие в поведении кривых времени обмена состояниями, в зависимости от того, присутствует примесь в квазиконической КТ или нет. При отсутствии примеси время обмена состояниями монотонно возрастает с ростом радиуса основания квазиконической КТ. Если же рассматривается задача квазиконической КТ в присутствии водородоподобной примеси, то локализация электронов при достаточно больших углах раствора квазиконической КТ осуществляется за счёт кулоновского поля примеси. Ясно, что, начиная с некоторого значения d , время обмена состояниями практически не зависит от радиуса квазиконической КТ, и кривая $\tau(d)$ имеет насыщающее поведение, стремясь к значению $\tau \sim 6 \cdot 10^{-8}$ сек.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключении представим основные результаты предлагаемой диссертационной работы:

1. В рамках адиабатического приближения построена теория межзонного электрооптического поглощения в сильно вытянутой ККТ. Получен аналитический вид для пороговых частот поглощения, а также выявлены правила отбора для межзонных переходов. Показано, что для магнитного и радиального квантовых чисел имеет место правила отбора $m \rightarrow m'$, $n \rightarrow n'$, а для аксиального квантового числа правила отбора отсутствуют. С ростом электрического поля порог поглощения в ансамбле из сильно вытянутых ККТ смещается в длинноволновую область (красное смещение).
2. Исследовано внутривозное поглощение в сильно вытянутых ККТ из $InAs$. Исследованы зависимости коэффициентов линейного и нелинейного поглощения от энергии падающего света на сильно вытянутых ККТ. Учтено влияние напряженности внешнего электрического поля на нелинейные характеристики ККТ. Показаны зависимости коэффициентов генерации второй и третьей гармоник от энергии падающего света. Расчеты сделаны при различных значениях внешнего электрического поля и температуры. Рост внешнего электрического поля приводит к росту пиков коэффициентов генерации второй и третьей гармоник.

3. Для сильно сплюснутой ККТ рассмотрена теория межзонного электропоглощения, при этом, влияние радиального электрического поля обсуждается в рамках теории возмущений. Получен аналитический вид для волновых функций и энергетического спектра частицы. Показано, что наложение радиального электрического поля приводит к новым правилам отбора по магнитному и аксиальному квантовому числу $m \rightarrow m' \pm 1, n_z \rightarrow n'_z$. Для ансамблей из ККТ, с ростом электрического поля наблюдается красное смещение порогового поглощения.
4. В рамках теории возмущений, по аналогии с атомом гелия, изучены двухэлектронные состояния в квазиконической КТ. Учет спина производится в приближении Рассела-Саундерса. Определены кулоновское и обменные поправки и исследованы зависимости этих поправок от геометрических параметров квазиконической КТ. Показано, что с ростом геометрических размеров КТ как кулоновское, так и обменные поправки уменьшаются. При этом, данные поправки более чувствительны к изменению угла раствора КТ. Определено время обмена состояниями между основным и первым возбужденным уровнями и показано, что оно составляет порядка 10^{-11} секунд, что на порядок меньше, чем в случае сферической КТ содержащее два электрона. С ростом геометрических размеров КТ из-за отталкивания между электронами перекрытие одноэлектронных волновых функций ослабевает, и время обмена состояний увеличивается.
5. В рамках теории возмущений построена теория дивалентных примесных состояний в предположении, что примесь локализована в вершине квазиконической КТ. Показано, что при фиксированном значении угла раствора квазиконической КТ с ростом боковой грани время обмена состояниями увеличивается, переходя в насыщение. При фиксированном значении боковой грани время обмена состояниями монотонно растет. Насыщение времени обмена состояниями связано с фактором локализации электронов в радиальном направлении вокруг примеси.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. P. Harrison. *Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics. University of Leeds, Leeds, United Kingdom 2005.*
2. R.K. Willardson. *Self-Assembled InGaAs-GaAs Quantum Dots. Academic Press 60: 1999.*
3. Է. Մ. Ղազարյան, Ս. Չ. Պետրոսյան. *Չիսսահամառոտահիննաստեղծվելությունիկայի ֆիզիկական հիմնքները. ՈՀՀ Հրատարակչություն 2005.*
4. T. Chakraborty *Quantum Dots. Amsterdam: Elsevier 1999.*
5. Ж.И. Алферов. История и будущее полупроводниковых гетероструктур. *ФТП. 32: 3-18, 1998.*
6. L. Jacak, P. Hawrylak, A. Wojs. *Quantum dots. Springer Science & Business Media 2013.*

7. D. Loss, D. P. Di Vincenzo. Quantum computation with quantum dots. *Physical Review A* **57(1)**: 120, 1998.
8. S. W. Koch. Semiconductor quantum dots. *World Scientific* **2**: 1993.
9. D. B. Hayrapetyan, E. M. Kazaryan, H. A. Sarkisyan. Magneto-absorption in conical quantum dot ensemble: Possible applications for QD LED. *Optics Communications* **371**: p.138-143, 2016.
10. D. B. Hayrapetyan, A. V. Chalvan, E. M. Kazaryan, H. A. Sarkisyan. Direct interband light absorption in conical quantum dot. *Journal of Nanomaterials* 2015.
11. D. A. Ospina, C. A. Duque, M. E. Mora-Ramos, J. D. Correa. Effects of external electric field on the optical and electronic properties of blue phosphorene nanoribbons: A DFT study. *Computational Materials Science* **135**: pp.43-53, 2017.
12. M. Grundmann, O. Stier, D. Bimberg. InAs/GaAs pyramidal quantum dots: Strain distribution, optical phonons, and electronic structure. *Physical Review B* **52(16)**: p.11969, 1995.
13. A. L. Efros. A. L. Efros. Interband absorption of light in a semiconductor sphere. *Sov. Phys. Semicond* **16(7)**: 772-775, 1982.
14. D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan. Adiabatic description of impenetrable particles in an infinitely deep potential well: *J. Contemp. Phys* **47 (5)**: 230–235 (2012).
15. A.A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S.I. Vinitzky, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan. The application of adiabatic method for the description of impurity states in quantum nanostructures: *J. Phys. Conf. Ser* **248**: 2010.

СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. K.S. Khachatryan, D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan. Strongly Prolate Conical Quantum Dot in an External Electric Field. *International Youth Conference on Electronics, Telecommunications and Information Technologies* **255**: 185-192, 2020.
2. K.S. Khachatryan, M.A. Mkrtchyan, D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan. Adiabatic description of the electroabsorption in strongly prolate and oblate conical quantum dots. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **134**: 114887, 2021.
3. K.S. Khachatryan. Nonlinear optical absorption in strongly prolate conical quantum dot in an external electric field. *International Youth Conference on Electronics, Telecommunications and Information Technologies* **268**: 343-348, 2021.

ԱՄՓՈՓ ԱԳԻՐ

1. Աղիաբատական մոտավորության շրջանակներում կառուցված է միջգոտիական էլեկտրասպտիկական կլանման տեսությունը խիստ ձգված կոնաձև քվանտային կետում: Ստացվել է եզրային հաճախականությունների կլանման անալիտիկ տեսքը, ինչպես նաև ստացվել են միջգոտիական անցումների ջոկման կանոնները: Ցույց է տրված, որ մագնիսական և շառավղային քվանտային թվերի համար ջոկման կանոններն են՝ $m \rightarrow m', n \rightarrow n'$, իսկ առանցքային քվանտային թվերի ջոկման կանոններ չկան: Էլեկտրական դաշտի աճի հետ մեկտեղ կլանման շեմը խիստ ձգված կոնական քվանտային կետերի անսամբլում տեղափոխվում է դեպի երկարալիքային տիրույթ (կարմիր տեղաշարժ):
2. Ուսումնասիրվել է ներգոտիական կլանումը խիստ ձգված InAs քվանտային կետերում: Հետազոտվել են գծային և ոչ գծային կլանման գործակիցների կախվածությունները ընկնող լույսի էներգիայից խիստ ձգված կոնաձև քվանտային կետերում: Դիտարկվել է արտաքին էլեկտրական դաշտի ազդեցությունը կոնաձև քվանտային կետերի ոչ գծային բնութագրերի վրա: Ստացվել են երկրորդ և երրորդ հարմոնիկի գեներացիաների գործակիցների կախվածությունները ընկնող լույսի էներգիայից: Հաշվարկները կատարվել են արտաքին էլեկտրական դաշտի և ջերմաստիճանի տարբեր արժեքների համար: Արտաքին էլեկտրական դաշտի աճը հանգեցնում է երկրորդ և երրորդ հարմոնիկի գեներացիաների գործակիցների զազաթների մեծացմանը:
3. Դիտարկվել է միջգոտիական էլեկտրակլանման տեսությունը խիստ սեղմված կոնաձև քվանտային կետերի համար, ընդ որում, ռադիալ էլեկտրական դաշտի ազդեցությունը քննարկվել է խոտորումների տեսության շրջանակներում: Ստացվել է մասնիկի ալիքային ֆունկցիաների և էներգիայի սպեկտրի անալիտիկ տեսքը: Ցույց է տրված, որ ռադիալ էլեկտրական դաշտի կիրառումը հանգեցնում է մագնիսական և առանցքային քվանտային թվերով նոր ջոկման կանոնների $m \rightarrow m' \pm 1, n_z \rightarrow n'_z$: Կոնաձև քվանտային կետերի անսամբլների համար նկատվում է եզրային կլանման կարմիր շեղում էլեկտրական դաշտի աճին զուգընթաց:
4. Խոտորումների տեսության շրջանակներում, հելիումի ատոմի համանման, հետազոտվել են երկէլեկտրոնային վիճակները քվազիկոնաձև քվանտային կետում: Սպինը հաշվի է առնվել Ռասել-Սաունդերսի մոտավորության շրջանակներում: Հաշվարկվել են

կուլոնյան և փոխանակման էներգիաների ուղղումները, և ուսումնասիրվել են այդ ուղղումների կախվածությունը քվազիկոնաձև քվանտային կետի երկրաչափական պարամետրերից: Ցույց է տրված, որ քվանտային կետերի երկրաչափական չափերի աճի հետ նվազում են ինչպես կուլոնյան, այնպես էլ փոխանակման ուղղումները: Ուղղորդում, այդ ուղղումները ավելի զգայուն են քվանտային կետի բացման անկյան փոփոխությունների նկատմամբ: Որոշվել է հիմնական և առաջին գրգռված մակարդակների միջև վիճակների փոխանակման ժամանակը և ցույց է տրվում, որ այն ունի 10^{-11} կարգ, ինչը մեկ կարգով ավելի փոքր է, քան երկու էլեկտրոն պարունակող գնդաձև քվանտային կետի դեպքում: Քվանտային կետի երկրաչափական չափերի մեծացմամբ, էլեկտրոնների միջև վանման պատճառով, թուլանում է մեկէլեկտրոնային ալիքային ֆունկցիաների փոխածածկումը և ավելանում վիճակների փոխանակման ժամանակը:

5. Խոտորումների տեսության շրջանակներում կառուցվել է երկվալենտ խառնուկային վիճակների տեսությունը այն ենթադրությամբ, որ խառնուկը տեղայնացված է քվազիկոնաձև ՔԿ-ի զազաթին: Ցույց է տրված, որ քվազիկոնաձև ՔԿ-ի բացման անկյան ֆիքսված արժեքի դեպքում կողմնային եզրի աճի հետ վիճակների փոխանակման ժամանակը աճում է՝ անցնելով հազեցած վիճակի: Կողմնային եզրի ֆիքսված արժեքի դեպքում վիճակների փոխանակման ժամանակը մոնոտոն աճում է: Վիճակների փոխանակման ժամանակի հազեցումը կապված է էլեկտրոնների խառնուկի շուրջ ռադիալ ուղղությամբ տեղայնացման փաստի հետ:

CONCLUSION

1. In the framework of the adiabatic approximation, a theory of interband electro-optical absorption in a strongly prolate conical quantum dot is constructed. An analytical view is obtained for the threshold absorption frequencies, as well as the selection rules for interband transitions are revealed. It is shown that for the magnetic and radial quantum numbers the selection rules are $m \rightarrow m', n \rightarrow n'$, and there are no selection rules for the axial quantum number. With the increase of the electric field the absorption threshold in an ensemble of strongly prolate conical quantum dots shifts to longer wavelengths (red shift).
2. Intraband absorption in strongly prolate InAs quantum dots has been studied. The dependences of linear and nonlinear absorption coefficients on the incident light energy on strongly prolate conical quantum dots are investigated. The influence of the external electric field strength on the nonlinear characteristics of the conical quantum dots is considered. The dependences of the second and third harmonic generation coefficients on the incident light energy are shown. The calculations were made for different values of the external electric field and temperature. The increase of the external electric field leads to the increase of the peaks of the generation coefficients of the second and third harmonics.
3. For a strongly oblate conical quantum dot the theory of interband electro-absorption is considered, and the influence of the radial electric field is considered in the framework of perturbation theory. An analytical form of the particle's wave functions and the energy spectrum is obtained. It is shown that the imposition of a radial electric field leads to new selection rules for the magnetic and axial quantum numbers $m \rightarrow m' \pm 1, n_z \rightarrow n'_z$. For the conical quantum dots' ensembles, the threshold absorption red shift is observed with the increase of the electric field.
4. In the framework of perturbation theory, by analogy with the helium atom, two-electron states in a quasi-conical quantum dot are studied. The spin is considered in the scope of Russell-Saunders approximation. The Coulomb and exchange corrections are determined, and the dependences of these corrections on the geometric parameters of the quasi-conical QD are investigated. It is shown that both the Coulomb and exchange corrections decrease with the increase of the geometrical sizes of quantum dots. Moreover, these corrections are more sensitive to changes in the quantum dot's opening angle. The exchange time of states between the ground and first excited levels is determined, and it is shown that it is about 10^{-11} seconds, which is an order of magnitude less than in the case of a spherical quantum dot, containing two electrons. With the increase of the geometrical quantum dots' sizes, due to the repulsion between electrons, the overlap of one-electron wave functions weakens, and the exchange time of states increases.

5. In the framework of perturbation theory, a theory of two-valence impurity states is constructed under the assumption, that the impurity is localized at the vertex of a quasi-conical QD. It is shown, that with the increase of the side edge the state exchange time increases, passing into saturation, when the value of the quasi-conical QD's opening angle is fixed. At a fixed value of the side edge, the state exchange time monotonically increases. The saturation of the state exchange time relates to the factor of localization of electrons in the radial direction around the impurity.