DOI 10.31891/2307-5732-2024-335-3-5
УДК 538.915

БУРДЕЙНИЙ ВОЛОДИМИР
Вінницький національний технічний університет
https://orcid.org/0009-0001-1109-0262
e-mail: brdnvldmr@ukrnet.com
КАСІЯНЕНКО ВАСИЛЬ
Вінницький національний технічний університет
https://orcid.org/0009-0003-0196-8929
e-mail: cassic1955@gmail.com

ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ЕЛЕКТРОНІВ У ЕЛЕКТРИЧНОМУ ПОЛІ ЗАРЯДЖЕНОГО КВАНТОВОГО НАНОКІЛЬЦЯ

Завдяки сучасним технологіям фізика конденсованого стану збагачується все новими об'єктами дослідження, які дозволяють не тільки поглибити знання про порівняно непогано вивчені ефекти, але передбачають можливості відкриття явищ, притаманних саме цим об'єктам, одним із прикладів яких є квантові кільця (КК). Як правило, маються на увазі замкнені криволінійні утворення, які разом з оточуючою їх матрицею, формують двозв'зну структуру, яка за своїм складом, внутрішньою будовою і іншими характерними ознаками відрізняється від свого оточення. Складові елементи КК, атоми чи більш складні агрегати, зв'язані між собою в певному сенсі сильніше, ніж з оточуючою матрицею. Квантові кільця також вирізняються з поміж інших систем, подібних за морфологією, в першу чергу своїми характерними розмірами, які за порядком величини належать мезо- або наноскопічному масштабу довжин. Вражаючі досягнення технології, такі як рентгенівська літографія, ассамблерування(самозбирання), молекулярно-пучкова епітаксія, атомна силова мікроскопія створили можливості формувати квантові кільця різної геометрії з різною кількістю носіїв заряду від кількох електронів до десятків, а то сотень (мезоскопічні квантові кільця). Повідомляється про створення квантових кілець гексагональної, прямокутної та стадіонної геометрії на поверхні напівпровідника з використанням технології маніпулювання атомами в скануючому тунельному мікроскопі. Одержані результати також вказують на можливість контрольованого впливу на динаміку електронів в налаштовуваному періодичному потенціалі, обіцяють створення двомірних штучних решіток на поверхні напівпровідника.

Визначальною характеристикою будь-якої системи, в тому числі носіїв заряду, які перебувають у полі КК, є їх енергетичний спектр. Саме від нього залежать оптичні, електрофізичні та інші властивості, які забезпечують перспективи практичного застування як відокремлених КК, так і їх комплексів. В контексті енергетичного спектру теоретичні дослідження в основному мають модельний характер і фокусуються на особливостях конфайнменту носіїв модельними утримуючими потенціалами, впливі електричних, магнітних полів, електромагнітного, зокрема лазерного, випромінювання. Проте, попри велику кількість робіт присвячених згаданій проблематиці, деякі її аспекти поки що залишаються недостатньо дослідженими. Це зауваження стосується спектру носіїв у електростатичному полі заряджених КК.

Квантове кільце, сформоване на поверхні металу або, що більш цікаво з огляду на можливі практичні застосування, імплантоване в напівпровідник, просторово обмежене гетеропереходами, які можуть накопичувати просторовий заряд контрольований відповідно створеними керуючими електродами. Електричне поле цього заряду, як, наприклад, поле домішкових центрів, може впливати на енергетичний спектр, викликаючи появу енергетичних рівнів у забороненій зоні. Саме дослідження таких енергетичних станів запропоноване у даній роботі. Тут розглядається тонке кільце з рівномірно розподіленим вздовж нього електричним зарядом занурене в напівпровідникову матрицю. Розв'язанням рівняння Пуассона, встановлено електростатичний потенціал, який описується повними еліптичними інтегралами першого роду. Досліджено поведінку потенціалу в околі особливих точок, на основі чого запропоновані апроксимуючі вирази для потенціальної енергії, які дозволяють розділити радіальний і поперечний щодо площини КК рухи носіїв.

Показано, що рух у поперечному напрямі в основному наближенні описується осциляторними функціями з відповідними значеннями енергії. При додатному заряді кільця в його околі для електронів виникає потенціальна яма з лінійною залежністю енергії від радіальної координати, а тому відповідна динаміка описується функціями Ейрі, що дозволило встановити у явній формі дисперсійне рівняння і знайти його наближені розв'язки. Показано, що одержані результат справедливі для квантових чисел, які обмежуються відношенням кулонівської енергії і мінімальної квантово-механічної енергії, пов'язаної із локалізацією частинки в області порядка розмірів кільця.

Ключові слова: квантове нанокільце, рівняння Пуассона, рівняння Шредінгера, квантовий гармонічний осцилятор, дисперсійне рівняння, функції Ейрі.

BURDEYNYY VOLODYMYR
Vinnytsia National Technical University
KASIYANENKO VASUL
Vinnytsia National Technical University

ELECTRON ENERGETIC SPECTRA IN THE ELECTRIC FIELG OF THE CHARGED QUANTUM NANORING

Due to modern technology successes, the condensed matter physics is enriched with new objects of research, which allow not only to deepen the knowledge of relatively well-studied effects, but also predict very promissing possibilities of discovering phenomena appropriated exclusively to these objects, one of the examples of which are quantum rings (QRs). Concerning to the quantum ring conception as a rule one understands some closed curvilinear region which with surrounding matrix forms two-connected structure. In their composition, internal construction and other characteristic features, QRs are basically different from their surroundings. QRs consist of

atoms, molecules or more complicated aggregates which in some sence are connected to each other more strongly than to the surrounding matrix. Quantum rings also are distinguished from other systems, similar in morphology, primarily by their characteristic sizes which by order of magnitude belong to the meso- or nanoscopic length scale

Impressive advances in technology, such as X-ray lithography, selfassembling, molecular beam epitaxy, and atomic force microscopy have created opportunities to form quantum rings of various geometries with a number of charge carriers that achives from a few to tens or even hundreds (mesoscopic quantum rings) of electrons. As far as geometric forms there are reported about syntheses of QRs not only with circular geometry but also hexagonal, tetragonal and stadium form created on a semiconductor surface by applying the atomic transposition methods based on the technology of atom manipulation in a scanning tunnelling or atomic force microscopy. A lot of results also point out on the possibility of controlled impact on the electron dynamics in a tunable periodic potential and promise the creation of two-dimensional artificial lattices on the surface of a semiconductor.

The determining characteristic of any system, including charge carriers that are affected by QRs field, is their energy spectra. Optical, electrophysical and other properties, which provide perspectives for the practical applications of both separated QRs and their complexes, depend on it. In the context of energy spectra, theoretical studies are mainly of a model nature and focus on the features of carrier confinement by model holding potentials, the influence of electric and magnetic fields or electromagnetic, particularly laser, radiation. However, despite of the large number of reports devoted to the energy spectra problem, some of its aspects remain at a long distance from complete on final results. This remark especially concerns the spectrum of carriers in the electrostatic field of charged QRs. A quantum ring , synthesized on the metal surface or, what can be more interesting due to enough promising practical applications, implanted in a semiconductor, is spacely limited by heterojunctions that are enable to accumulate some space charge controlled with special electrodes structure. The electric field of this charge by analogy with the fields of impurity centers, can modify the energy spectra causing appearance of energetic levels in the forbidden zone. The study of such energy states is the purpose of this paper. Here a thin uniformly charged ring immersed into a semiconductor matrix has been considered. By solving the Poisson equation, the electrostatic potential is found. It turns out that the potential can be expressed in terms of complete elliptic integrals of the first kind. Behavior of the potential in the vicinity of singular points allows to introduce and justify some approximate expressions for the electron potential energy. Due to accepting these approximations it became possible to separate the radial and transverse movements of carriers.

It has been shown that the transverse movement in applied here basic approximation is described in terms of harmonic oscillator functions with corresponding energy values. If the ring is positively charged, a potential well for electrons appears. In the immediate vicinity of the ring the potential energy is approximated by a linear dependence on the radial coordinate. Therefore the corresponding dynamics are described by Airy functions, which made it possible to establish the dispersion equation in its explicit form and to find approximate solutions for eugen values of energy. It was also shown that obtained results are applicable and correct if quantum numbers are restricted by the ratio of Coulomb energy and minimum quantum mechanical energy associated with the localization of particles in the region commensurable with ring size.

Key words: quantum nanoring, Poisson's equation, Schedinger's equation, quantum harmonic oscillator, dispersion equation, Airy functions.

Постановка проблеми. Огляд джерел. Мета роботи

Для синтезу квантових кілець (КК) застосовується чи не весь арсенал технологічних прийомів фізики конденсованого стану. Вибір технології в значній мірі залежить не тільки від структури, композиції та морфології КК, а і від природи кристалу-матриці чи підкладки. Наприклад, коли підкладкою для КК є метал, то історично першим і, як виявилося досить успішним, був метод транспозиціювання атомів за допомогою технічних засобів, які надала електронна скануюча тунельна спектроскопія. Саме перенесенням атомів, продемонстроване авторами широковідомого мему IBM, лягло в основу створення багатої колекції квантових кілець, у вигляді так званих квантових коралів, синтезованих і досліджених Ейглером і співробітниками[1], які в ранніх 90-их запровадили [2] високоточне позиціювання атомів ксенону на поверхні нікелю і перенесенням 48 атомів заліза на поверхню міді сформували квантове кільце типу «квантовий корал». Як приклад створення КК методом маніпулювання окремими атомами на поверхні напівпровідника можна послатися дослідження, представлене роботою [3], в якій повідомляється про синтез КК у формі правильного шестикутника.

Квантові кільця синтезовані на основі напівпровідникових матеріалів представлені багатим набором вихідних компонентів, якими є бінарні напівпровідники і потрійні сполуки на їх основі. Зокрема, авторами роботи [4] описані приклади таких структур як InAs-GaAs , InAs-InP, InAs-$Al_xIn_{1-x}As$. Напівпровідникові квантові кільця формуються епітаксіальними технологіями в поєднанні з літографією високої роздільної здатності. Автори [4] підкреслюють, що хоча одержувані нанооб′єкти можуть бути досить неоднорідні за формою і розмірами має місце відчутна частка кілець, в тому числі ексцентричних, з гетерограницями майже ідеальної колової форми.

Ще одним ефективним методом створення КК є само збірка (асамблерування). В роботі[5] повідомлено про синтез само збіркою одномірних і двомірних наноструктур на сходинках віцинальних поверхонь металів. Що стосується напівпровідників, то, як свідчать дані роботи [6], вдалося успішно застосувати метод асамблерування, апробований на синтезs квантових точок з InGaAs, для формування КК в матриці з арсеніду галію. За даними авторів роботи [7] атомна силова мікроскопія показала, що вдалося синтезувати кільцеподібні структури з товщиною в інтервалі 4-5 нм із зовнішнім радіусом біля 70 нм та внутрішнім радіусом в межах10-15 нм.

В роботі [8] порівнюються різні технології з огляду відтворюваності результатів синтезу і його масштабування. Авторами підкреслюється, що само збірка в силу природної неоднорідності і просторової хаотичності в локалізації КК обмежують їх потенціальні можливості для створення однорідних і впорядкованих структур протягом епітаксії, що все ще залишається серйозним викликом. В зв′язку з цим у згаданій роботі запропоновано поєднання молекулярної пучкової епітаксії з формуванням регулярної структури шляхом нанесення на поверхні напівпровідника рисунка завдяки інтерференції чотирьох лазерних пучків. Це поєднання дозволило одержати однорідні структури з квантових точок і квантових кілець на основі GaAs-AlGaAs та InAs/GaAs розподілені на великих площах, що суттєвим для виробництва

регулярних наноструктур в промисловому масштабі.

Сучасні технології дозволяють створювати квантові кільця різноманітної форми та різних розмірів. Показовими у цьому контексті є кільця синтезовані з використанням технічних можливостей атомних силових мікроскопів та скануючої тунельної мікроскопії. В останньому випадку, як описується в роботі[9], окрім кільця колової форми приводяться приклади коралів у формі правильного трикутника складеного із 72 атомів заліза, квадрата (56 атомів Fe), більярда типу стадіон (76 атомів заліза). КК у формі правьльного шестикутника вивчалося в раніше згаданій роботі[3] Фосфоренове квантове кільце прямокутної геометрії досліджувалося авторами роботи[10]. Епітаксія у різних її версіях і літографія [11,12] дозволяють синтезувати кільця різної, в тому числі і правильної форми. Багатство форм стимулює теоретичні дослідження все нових моделей. Крім найбільш дослідженої і найпростішої моделі плоского концентричного кільця [13] достатнє відображення знайшли інші моделі, наприклад ексцентричного кільця [4], тороїдального кільця з прямокутним поперечним перерізом[14], подвійних квантових кілець[15, 16]. В роботі[17] досліджуються так звані квантові кільця Манделброта з геометрією, в якій внутрішня границя має колову форму, тоді як зовнішня є одним із фракталів Манделброка порядку m=7,8,9,10.

В той час коли технологія фокусується на розробці методів синтезу кілець з наперед заданими формами, розмірами, відтворюваними електрофізичними, магнітними, оптичними та іншими цікавими для застосувань властивостями, теоретичні дослідження зосереджені на умовах конфайнменту носіїв заряду, енергетичному спектрі, хвильових функціях, реакцією частинок на дію зовнішніх полів. Сукупність наукових джерел, які стосуються вивчення енергетичного спектру квантових кілець настільки багато численна, що виявляється досить складним завданням подати тут більш менш детальну бібліографію, яка б мала відношення навіть лише до порівняно вузької проблематики енергетичного спектру. Проте, у контексті даної роботи варто відзначити, що більшість із вище згаданих досліджень, зокрема [2, 4, 7, 13-16] в основному присвячені саме теорії енергетичного спектру і його проявам.

В теорії енергетичних спектрів квантові кільця розглядаються як наноструктури, які захоплюють і утримують електрони. При цьому конфайнмент забезпечується жорсткими непроникними стінками [2.3] чи параболічним потенціалом. В багатьох роботах, особливо тих, в яких досліджуються кільця з малою кількістю захоплених електронів, в тому чи іншому наближенні розв'язується хвильове рівняння для внутрішньої області одиночного чи подвійного КК. Останнім часом виконані дослідження, в яких розглядаються заряджені КК. В одній із них [18] одержані точні розв'язки квантово-механічної задачі для КК нескінченно малої товщини, в одній із точок якого перебуває заряджена частинка. Модельний потенціал, створеного нею поля, описується дельта-функцією Дірака, що не узгоджується з кулонівським потенціалом, але дозволило авторам розв'язати поставлену ними задачу, а саме-встановити точні хвильові функції і власні значення відповідного оператора Гамільтона.

Оскільки дослідження енергетичного спектру зарядженого квантового кільця, які б відповідали моделям, ближчим до реальності далеко не завершені, то саме розв'язання рівняння Шредінгера для частинки, яка перебуває в електростатичному полі, розрахованому із перших приуципів є метою даної роботи.

За своєю структурою робота складається із трьох частин: в першій встановлюється точний потенціал електричного поля, в другій записується рівняння Шредінгера і вводяться основні наближення для потенціальної енергії. Третя і четверта частини присвячені хвильовим функціям і власним значенням енергії. Закінчується робота обговоренням результатів.

Виклад основного матеріалу

1. Потенціал електричного поля рівномірно зарядженого тонкого квантового кільця

Тут розглядається кільце радіуса R, яке несе рівномірно розподілений заряд q. При рівномірному розподілі по нескінченно тонкому кільцю, розташованому у площин $z=0$, густина заряду описується співвідношенням

$$\rho = C\delta(z)\delta(r-R) \tag{1}$$

в якому $\delta(x-a)$ – дельта функція Дірака, а r – радіальна координата у циліндричній системі координат. Константа C визначається інтегруванням густини заряду по об'єму, тобто

$$\int \rho(z,r)dV = C\int \delta(z)\delta(r-R)dV = q \tag{2}$$

Звідси одержується рівняння

$$C\cdot 2\pi R = q \tag{3}$$

з якого одержується:

$$C \equiv \tau = \frac{q}{2\pi R} \tag{4}$$

Таким чином , константа C є не що інше,як лінійна густина заряду.

Стосовно потенціалу електростатичного поля, то він є розв'язком рівняння Пуассона, яке для даного випадку записується так

$$\nabla^2\Phi = -\frac{\tau}{\varepsilon\varepsilon_0}\delta(z)\delta(r-R) \tag{5}$$

Підставивши в (5) розклад потенціалу в інтеграл Фур'є, визначений формулою:

$$\Phi(z,\vec{r}) = \int \Phi(\kappa,\vec{k})e^{i(\kappa z+\vec{k}\vec{r})}d\kappa d\vec{k} \tag{6}$$

де (k_x, k_y, κ) – компоненти тримірного хвильового вектора, Фур'є амплітуду можна виразити співвідношенням

$$\Phi(\kappa,\vec{k}) = \frac{R\tau}{4\pi^2(k^2+\kappa^2)\varepsilon\varepsilon_0}J_0(kR) \tag{7}$$

При записі (7) використані попередні позначення компонент хвильового вектора і враховано,що інтегрування по азимутальному куту приводить до функції Бесселя $J_0(kR)$. Поєднання Фур'є - амплітуди потенціалу, визначеної рівнянням (7), з формулою (6) приводить до співвідношення:

$$\Phi(z,\vec{r}) = \frac{R\tau}{4\pi^2\varepsilon\varepsilon_0}\int\frac{e^{-i(\kappa z+\vec{k}\vec{r})}J_0(kR)d\kappa d\vec{k}}{\kappa^2+k^2} \tag{8}$$

яке після інтегрування по змінній κ і азимутальному куту набуває якого вигляду:

$$\Phi(z,\vec{r}) = \frac{R\tau}{2\varepsilon\varepsilon_0}\int_0^\infty e^{-k|z|}J_0(kR)J_0(kr)dk \tag{9}$$

Останній інтеграл є табличним[19], що дозволяє записати остаточний результат

$$\Phi(z,\vec{r}) = \frac{R\tau}{\pi\varepsilon\varepsilon_0[z^2+(r+R)^2]^{1/2}}K\left(\frac{2\sqrt{rR}}{[z^2+(r+R)^2]^{1/2}}\right), \tag{10}$$

в якому $K(x)$ – повний еліптичний інтеграл першого роду.

Очевидно, що одержаний точний потенціал суттєво відрізняється як від модельного, використаного у роботі[18], так і від того, з яким досліджується енергетичний спектр електронів у роботі [20]. Автори останнього дослідження вважають, що КК забезпечує конфайнмент електронів у радіальному напрямі і потенціал має вигляд нескінченно глибокої двомірної потенціальної ями з плоским дном. Проте застосоване ними наближення для потенціалу обмежене тим, що є справедливе лише для точок, які перебувають на осі симетрії кільця, і , в свою чергу, є окремим випадком формули (10) при $r = 0$.

2. Рівняння Шредінгера для електрона в утримуючому полі.

Розглядаючи в якості зарядженої частинки електрон , заряд якого дорівнює $-e$ для рівняння Шредінгера можна записати стандартне співвідношення, а саме:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r},z) - e\Phi(\vec{r},z)\Psi(\vec{r},z) = E\Psi(\vec{r},z) \tag{11}$$

Очевидно, що знайти аналітичний розв'язок хвильового рівняння (11) при потенціалі, заданого формулою (10), малоймовірно. Тому виникає необхідність звернутися до певних наближень. Динаміка частинки суттєво залежить від поведінки потенціалу в околі екстремальних точок. Таким чином, має зміст апроксимувати потенціал $\Phi(z,\vec{r})$ його розкладом за степенями відхилень координат від їх значень в екстремальних точках. Вважаючи для визначності, що заряд кільця $q > 0$ і для електрона він створює сили притягання та приймаючи до уваги властивості еліптичного інтеграла першого роду, можна переконатися, що особливими є центр кільця, тобто точка з $z = 0$ і $r = 0$, а також всі точки, які належать кільцю і мають циліндричні координати $z = 0$, $r = R$ при довільних значеннях азимутального кута $\varphi \in [0, 2\pi]$. Аналіз показує, що при вибраному додатному заряді, центр кільця є сідловою точкою. Що ж до точок власне кільця, то в їх околі потенціал має розбіжність логарифмічного типу.

Починаючи із розкладу потенціалу по степенях z і обмежившись основними квадратичними доданками, з точністю до $o(z^4)$ можна записати:

$$\Phi(z,\vec{r}) \approx \frac{q}{2\pi^2\varepsilon\varepsilon_0}\left\{\frac{1}{R(1+\eta)}K\left(\frac{2\sqrt{\eta}}{1+\eta}\right) - \right.$$
$$\left. -\frac{1}{2R^3(1+\eta)^3}\left[K\left(\frac{2\sqrt{\eta}}{1+\eta}\right)+\frac{2\sqrt{\eta}}{1+\eta}\frac{dK(k)}{dk}\bigg|_{k=\frac{2\sqrt{\eta}}{1+\eta}}\right]z^2\right\} \tag{12}$$

Тут з метою компактизації формул прийняті позначення.

$$\eta = \begin{cases} r/R \ , & r < R; \\ R/r \ , & r > R, \end{cases} \tag{13}$$

Слід зауважити, що співвідношенні (12) має місце для випадку $r < R$. Якщо $r > R$, то у виразі (12) слід виконати заміну $R \to r$ і для η вибрати друге із означень (13).

Як відомо[25] похідна від еліптичного інтеграл $K(k)$ по його модулю визначається так:

$$\frac{dK(k)}{dk} = \frac{1}{k}\left[\frac{1}{k'^2}E(k) - K(k)\right] \tag{14}$$

де $k' = (1-k^2)^{1/2}$ – доповнюючий модуль, а $E(k)$ – повний еліптичний інтеграл другого роду. Після підстановки в (14) значення модуля $k = 2\sqrt{\eta}/(1+\eta)$ та використання властивостей еліптичних інтегралів, згідно з якими

$$K\left(\frac{2\sqrt{\eta}}{1+\eta}\right) = (1+\eta)K(\eta) \ \ , \ E\left(\frac{2\sqrt{\eta}}{1+\eta}\right) = \frac{1}{1+\eta}\left[2E(\eta) - (1-\eta^2)K(\eta)\right] \tag{15}$$

можна переконатися, що для потенціалу в квадратичному по z наближенні матиме місце такий остаточний результат:

$$\Phi(z,\vec{r}) \approx \frac{q}{2\pi^2\varepsilon\varepsilon_0}\left\{\frac{K(\eta)}{R} - \frac{z^2}{2R^3(1+\eta)^2}\left(\frac{2E(\eta)}{(1-\eta)^2} - \left(\frac{1+\eta}{1-\eta}\right)K(\eta)\right)\right\} \tag{16}$$

На відміну від раніше згаданої роботи[20], в якій утримання електрона забезпечується двомірною нескінченно глибокою потенціальною ямою з плоским дном, а тому коефіцієнт жорсткості використаного там потенціалу не залежить від полярного радіусу, у відповідності з (18) така залежність не тільки має місце, але не може бути знехтуваною. Дійсно, в границі $\eta \to 1$ цей коефіцієнт демонструє сингулярність, змінюючись як $(1-\eta)^{-2}$. Фізична природа цієї розбіжності цілком очевидна і є наслідком того, що в початково прийнятій моделі розглядається кільце з товщиною , яка дорівнює нулю. Регуляризацію потенціалу можна здійснити, врахувавши, що в більш реалістичній моделі КК має скінченну товщину $2a$. При врахуванні скінченної товщини КК сингулярність усувається, а в околі внутрішньої і зовнішньої границі кільця радіальна змінна η набуває одне з відповідних значення $\eta = 1 \mp a/R$. А тому використання асимптотичної поведінки еліптичних інтегралів при $\eta \to 1$ в основному порядку по малому параметру a/R для досліджуваного коефіцієнта жорсткості дає для остаточне значення, яке записується так:

$$-\frac{1}{4Ra^2}\left[1 - \frac{a}{R}\ln\left(2\sqrt{\frac{2R}{a}}\right)\right] \tag{17}$$

Залежність потенціалу від полярного радіусу визначається доданком нульового порядку по z. Цей доданок у відповідності з означенням (15) і формулою (16) дорівнює $K(r/R)/R$ при $r < R$ і $K(R/r)/r$ при $r > R$.

Розклад еліптичного інтегралу по степенях відхилення r від граничних точок кільця в основних порядках по тому ж самому малому параметру a/R приводить до співвідношення

$$\frac{K(\eta)}{R} \approx \frac{1}{R}\ln\left(2\sqrt{\frac{2R}{a}}\right) - \frac{|r-R|}{a^2} \tag{18}$$

Нарешті, поєднання формул (16)-(18) дає апроксимацію потенціалу в околі логарифмічних особливих точок в такій остаточній формі:

$$\Phi(\vec{r},z) \approx \frac{q}{2\pi^2\varepsilon\varepsilon_0}\left\{\frac{1}{R}\ln\left(2\sqrt{\frac{2R}{a}}\right) - \frac{|r-R|}{a^2} - \frac{z^2}{4Ra^2}\left[1 - \frac{a}{R}\ln\left(2\sqrt{\frac{2R}{a}}\right)\right]\right\} \tag{19}$$

Таким чином, хвильове рівняння (11) набуває наступного вигляду

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_{\vec{r}}^2 + \partial_z^2)\Psi(\vec{r},z) + \left(U_a\frac{|r-R|}{a} + \frac{m\omega^2 z^2}{2}\right)\Psi(\vec{r},z) = \tilde{E}\Psi(\vec{r},z) \tag{20}$$

Величини, які введені в рівняння Шредінгера (20), мають простий зміст, а саме

$U_a = \dfrac{e \cdot q}{2\pi^2 \varepsilon\varepsilon_0 a}$ – за порядком величини є потенціальною енергією електрона на границі кільця, відрахована від його середньої лінії, $\omega = \left\{ \dfrac{e \cdot q}{4m\pi^2 \varepsilon\varepsilon_0 R a^2} \left[1 - \dfrac{a}{R} \ln\left(2\sqrt{\dfrac{2R}{a}} \right) \right] \right\}^{1/2}$ – циклічна частота класичних гармонічних коливань вздовж осі кільця,

а $\tilde{E} = E + \dfrac{e \cdot q}{2\pi^2 \varepsilon\varepsilon_0} \dfrac{1}{R} \ln\left(2\sqrt{\dfrac{2R}{a}} \right) = (E - E_q)$ – енергія зі зміщеним за рахунок кулонівської взаємодії початком відліку.

3. Хвильові функції електрона в полі квантового кільця

Із співвідношення (10) випливає, що потенціал електростатичного поля рівномірно зарядженого КК не залежить від азимутального кута. Ця властивість зберігається і для апроксимації, вираженої формулою (19). Отже, оператор Гамільтона має осьову симетрію, в силу чого рівняння Шредінгера (20) допускає розділення змінних в циліндричній системі координат. Записавши $\Psi(\vec{r}, z)$ в мультиплікативній формі,

$$\Psi(\vec{r}, z) = e^{il\varphi} F(r) Z(z) \tag{21}$$

в якій ціле число l відіграє роль орбітального квантового числа, та прийнявши до уваги, що залежність потенціальної енергії від $z-$координати відповідає гармонічному осцилятору, для радіальної складової хвильової функції $F_{l,n}(r)$ одержується рівняння:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rF_{l,n}) + \frac{l^2}{r^2} F_{l,n} \right] + U_a \frac{|r-R|}{a} F_{l,n} = (\tilde{E} - E_n) F_{l,n} \tag{22}$$

Тут $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ – власне значення енергії гармонічного осцилятора, яке відповідає добре відомій[21] власній функції $Z(z) = Z_n(z)$.

Стандартним переходом до нової хвильової функції $f_{l,n}(r)$ за співвідношенням

$$F_{l,n}(r) = r^l f_{l,n}(r) \tag{23}$$

рівняння (22) можна привести до редукованої форми, тобто такої, в якій відсутній доданок з похідною першого порядку. Підстановка (23) в (22) дає для нової радіальної хвильової функції наступне рівняння:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} f_{l,n} + \left[U_a \frac{|r-R|}{a} - \frac{\hbar^2 (l^2 - 1/4)}{mR^3}(r-R) \right] f_{l,n} = \\ = \left[\tilde{E} - E_n - \frac{\hbar^2 (l^2 - 1/4)}{2mR^2} \right] f_{l,n} \end{aligned} \tag{24}$$

З рівняння (27) випливає, що ефективна потенціальна енергія електрона в залежності від полярного радіусу має вигляд несиметричної трикутної потенціальної ями. Добре відомо[21], що квантова динаміка частинки в лінійно залежному від координати потенціалі виражається у термінах функцій Ейрі [19]. Для цього попередньо виявляється зручним перейти до нових змінних ξ і $\tilde{\xi}$ визначених виразами:

$$r = \begin{cases} -\xi\left(\dfrac{\hbar^2 R}{2mw} \right)^{1/3} + \dfrac{(w - \mathrm{E})R}{w}, & r < R \\ \tilde{\xi}\left(\dfrac{\hbar^2 R}{2m\tilde{w}} \right)^{1/3} + \dfrac{(\tilde{w} + \mathrm{E})R}{\tilde{w}}, & r > R \end{cases} \tag{25}$$

де

$$w = U_a \frac{R}{a} + \frac{\hbar^2 (l^2 - 1/4)}{mR^2},\ \tilde{w} = U_a \frac{R}{a} - \frac{\hbar^2 (l^2 - 1/4)}{mR^2},\ \mathrm{E} = \tilde{E} - E_n - \frac{\hbar^2 (l^2 - 1/4)}{2mR^2}$$

Після цього (24) в залежності від співвідношень між полярним радіусом і радіусом кільця розпадається на наступні два рівняння:

$$\partial_\xi^2 f_{l,n} - \xi f_{l,n} = 0,\ r < R\ ;\ \partial_{\tilde{\xi}}^2 f_{l,n} - \tilde{\xi} f_{l,n} = 0,\ r > R \tag{26}$$

Фундаментальними розв′язками кожного із цих рівнянь , як відомо[19], і є функції Ейрі. Дві з них, а саме $Bi(\xi)$ і $Bi(\tilde{\xi})$ експоненційно зростають за межами ями, а тому не можуть бути фізично допустимими розв'язками рівнянь (26). Врахування осцилюючої поведінки та згасання за межами ями дозволяє зробити висновок, за яким розв'язками цих рівнянь мають бути функції Ейрі $Ai(\xi)$ і $Ai(\tilde{\xi})$.

Повернувшись до мультиплікативної форми (21) та прийнявши до уваги означення (23) можна записати остаточний вираз для ненормованої хвильової функції електрона, який утримується в потенціальній ямі створеної зарядженим кільцем:

$$\Psi_{nl}(\vec{r},z)=Ce^{il\varphi}r^{l}Z_{n}(z)\begin{cases}Ai(\xi)\ , r<R\\ Ai(\tilde{\xi})\ , r>R\end{cases} \tag{27}$$

де $C-$ постійна нормування.

4. Квантування руху в площин кільця, дисперсійне рівняння і енергетичний спектр електронів.

В класичних точках повороту функції Ейрі змінюють свою поведінку з осцилюючої на експоненційно згасаючу. А тому, поклавши у формулах (25) значення $\xi=0$ і $\tilde{\xi}=0$, для класичних лівої r_l і правої r_r точок повороту можна одержати такі співвідношення:

$$r_l=R-R\frac{\mathrm{E}}{w}\ ,\ r_r=R+R\frac{\mathrm{E}}{\tilde{w}} \tag{28}$$

Отже, фінітний рух і , відповідно, зв'язані з КК стани електрона, матиме місце в інтервалі

$$r_l\le r\le r_r \tag{29}$$

тобто , в смузі з шириною, яка дорівнює $R\mathrm{E}(1/\tilde{w}+1/w)$.

За межами цієї смуги кожна зі змінних, як ξ так і $\tilde{\xi}$, мають додатні значення, причому при $r\to\infty$ одна з них, а саме $\tilde{\xi}$ теж прямує до нескінченності. Стосовно центра кільця, то в цій точці

$$\xi\big|_{r=0}=\left(\frac{2mw}{\hbar^2}\right)^{1/3}R^{2/3}\left(1-\frac{\mathrm{E}}{w}\right)$$

і в силу того, що у досліджуваній моделі КК $R>>a$ для відповідного значення змінної ξ виконується нерівність $\xi\big|_{r=0}>>1$. Описана поведінка змінних по різні сторони від точок повороту в поєднанні з обмеженістю хвильових функцій підтверджує раніше зроблений висновок щодо вибору розв'язків рівнянь (26).

Ці розв'язки записуються так:

$$f_{l,n}(\tilde{\xi})=\alpha Ai(\tilde{\xi})\ ,\ r>R \tag{30}$$

$$f_{l,n}(\xi)=\beta Ai(\xi)\ ,\ r<R \tag{31}$$

Коефіцієнти α і β потрібно вибрати так, щоб хвильова функція разом зі своєю першою похідною була неперервною при $r=R$. Ці вимоги неперервності приводять до системи рівнянь

$$\begin{cases}\beta Ai(\xi_R)=\alpha Ai(\tilde{\xi}_R)\\ \beta\kappa Ai'(\xi_R)=-\alpha\tilde{\kappa}Ai'(\tilde{\xi}_R)\end{cases} \tag{32}$$

в якій $\kappa=\left(\frac{2mw}{\hbar^2R}\right)^{1/3}$, $\tilde{\kappa}=\left(\frac{2m\tilde{w}}{\hbar^2R}\right)^{1/3}$, а $Ai'(\xi)-$ похідна від функції Ейрі.

Рівняння на власні значення випливає з умови. за якою детермінант системи (32) має бути рівним нулю. Вказана вимога дає секулярне рівняння в наступній формі:

$$\tilde{\kappa}Ai(\xi_R)Ai'(\tilde{\xi}_R)+\kappa Ai(\tilde{\xi}_R)Ai'(\xi_R)=0 \tag{33}$$

В рамках раніше прийнятих апроксимацій щодо потенціальної енергії дисперсійне рівняння (33) є точним. Проте розв'язання його вимагає застосуванням числових методів. Аналітичні ж розв'язки можна знайти для граничних випадків. Один з них стосується важливого для практики основного і близьких до нього стаціонарних станів. Радіус локалізації таких станів малий у порівнянні із радіусом КК. Це означає, що доданком, який у рівнянні (24) відповідальний за асиметрію потенціальної енергії і пов'язаний з відцентровою енергією можна знехтувати. При цьому введені раніше величини набувають таких значень:

$$w=\tilde{w}=U_a(R/a)\equiv w_a\ ,\ \xi_R=\tilde{\xi}_R=-\mathrm{E}\left(\frac{2mR^2}{\hbar^2w_a^2}\right)^{1/3}\equiv\xi\ ,\ \kappa=\tilde{\kappa}=\left(\frac{2mw_a}{R\hbar^2}\right)^{1/3} \tag{34}$$

а рівняння (33) зводиться до наступного спрощеного вигляду:

$$Ai(\xi)Ai'(\xi)=0 \tag{35}$$

Таким чином в основному по відцентровій енергії наближенні розв'язками дисперсійного рівняння є нулі функції Ейрі від'ємного аргументу або нулі похідних від цієї функції, причому, оскільки хвильова функція основного стану не має вузлів, то йому відвідає саме перший нуль похідної .

Позначивши ці нулі як $-\xi_p$, та прийнявши до уваги означення величин ξ і E, для власних значень енергії низько збуджених станів можна отримати співвідношення

$$E_{nlp}=\hbar\omega(n+1/2)+\frac{\hbar^2(l^2-1/4)}{2mR^2}+\xi_p\left(\frac{\hbar^2w_a^2}{2mR^2}\right)^{1/3}+E_q \tag{36}$$

Тут перші кілька нулів, які стосуються основного і близьких до нього станів, мають такі значення[19]: $\xi_1=1,02$, $\xi_2=2,34$, $\xi_3=3,25$, $\xi_4=4,09$, $\xi_5=4,82$. Ще вісім значень отримуються лінійною інтерполяцією даних з тих же таблиць. Що ж до наступних значень, о можна звернутися до асимптотики відповідних функцій або їх нулів.

Зі зростанням енергії збуджених станів в тому числі і рівня збудження орбітального моменту значення ξ_R і $\tilde{\xi}_R$ потрапляють у область, де

$$\left|\xi_R\right|=\mathrm{E}\left(\frac{2mR^2}{\hbar^2w^2}\right)^{1/3}>>1 \qquad \left|\tilde{\xi}_R\right|=\mathrm{E}\left(\frac{2mR^2}{\hbar^2\tilde{w}^2}\right)^{1/3}>>1 \tag{37}$$

При виконанні (37) функція Ейрі та її похідна мають асимптотичну поведінку, яка описується формулами[19]:

$$\begin{aligned} Ai(-z)&\approx\pi^{-1/2}z^{-1/4}Sin(2z^{3/2}/3+\pi/4)\,,\\ Ai'(-z)&\approx-\pi^{-1/2}z^{1/4}Cos(2z^{3/2}/3+\pi/4)\end{aligned} \tag{38}$$

Підстановка цих асимптотичних виразів у (33) приводить до суттєвого спрощення секулярного рівняння. яке набуває такого вигляду:

$$\left(\frac{2m\mathrm{E}}{\hbar^2R}\right)^{1/2}Cos\left[\frac{2}{3}(\xi_R^{3/2}+\tilde{\xi}_R^{3/2})\right]=0 \tag{39}$$

розв'язання якого для енергії E дає результат

$$\mathrm{E}_p=\left[\frac{3\pi\hbar(p+1/2)w\tilde{w}}{R\sqrt{2m}(w+\tilde{w})}\right]^{2/3} \tag{40}$$

Для достатньо великих значень квантового числа p і плавного потенціалу енергетичний спектр можна встановити застосуванням методу ВКБ[21]. Відповідні обчислення показують, що формула (40) в точності співпадає із результатом, який одержується в рамках цього методу, чим в деякій мірі виправдовується застосування асимптотичних співвідношень (38).

Поєднання виразу (40) з раніше введеними позначеннями і одержаними співвідношеннями , для випадку високо збуджених станів радіального руху приводить до остаточного результату у такому вигляді:

$$E_{nlp}=\hbar\omega(n+1/2)+\frac{\hbar^2(l^2-1/4)}{2mR^2}+\left(\frac{3\pi\hbar(p+1/2)w\tilde{w}}{\sqrt{2m}R(w+\tilde{w})}\right)^{2/3}+E_q \tag{41}$$

Формули (36) і (41), які покривають як низько-, так і високозбуджені зв'язані стани і є основними результатами даної роботи.

Висновки. Обговорення результатів

Спектр електронів у електричному полі зарядженого КК (формули (36), (41)) і відповідні йому хвильові функції встановлено при деяких припущеннях щодо співвідношень між радіусами локалізації власних функцій квантування поперечного руху та тих, які описують рух у радіальному напрямі. Мірою локалізації поперечного руху є середнє квадратичне відхилення електрона $\overline{z}_n$ щодо площини КК $z=0$. В прийнятих наближеннях цей рух описується осциляторними хвильовими функціями, а тому $\overline{z}_n\approx(n\hbar/m\omega)^{1/2}$. Вищими порядкам розкладу потенціалу за степенями z можна знехтувати, якщо $\overline{z}_n<<R$. Прийнявши до уваги явні вирази для частоти і середньо квадратичного відхилення, цю умову застосовності осциляторного наближення можна привести до остаточного вигляду. а саме $n<<(meqR^3/4\pi^2\hbar^2\varepsilon\varepsilon_0a^2)^{1/2}$. Оскільки тут у правій частині міститься відношення незалежних між собою кулонівської енергії до мінімальної енергії електрона у потенціальній ямі з шириною R, то існують

такі комбінації параметрів, які забезпечують можливість обмежитися квадратичними по z степенями потенціалу. Хвильові функції радіального руху експоненційно спадають за межами потенціальної ями. А тому в якості радіуса локалізації цих функцій можна прийняти розміри області класично дозволеного руху, тобто $\overline{r}_p = R(\mathrm{E}_p / w)$. Умова можливість обмежитися лінійними членами розкладу потенціалу за степенями $(r-R)/R$ зводиться до співвідношення $\xi_p << (meqR^3 / \pi^2\hbar^2\varepsilon\varepsilon_0 a^2)^{1/3}$, яке виражається в термінах вище згаданих енергій і може забезпечитись у широкому інтервалі параметрів.

По мірі зростання квантових чисел вказані умови стануть близькими до критичних, але відомі хвильові функції дозволяють, поки це можливо, знайти поправки до власних значень енергії методами теорії збурень.

При додатному заряді КК його центр для потенціальної енергії електрона є сідловою точкою з максимумом при $r = 0$. Саме тому електрони скочуються в потенціальну яму в околі власне кільця і утримуються нею. У цьому ж випадку для дірок центр кільця залишається бути сідловою точкою з мінімум умом при $r = 0$. Залежність потенціальної енергії дірок від координати z має вигляд квадратичного потенціального бар'єру, тобто виступає у ролі розсіючого центру. Вказані особливості можуть позначитися на формуванні і спектрі екситонів, що вимагає окремих досліджень.

Література

1. Eigler D.M., Shweizer E.K. Positioning single atoms with a scanning tunneling microscope. Nature. 1990. Vol. 344. P. 524–526.
2. Crommie M.F., Lutz C.P., Eigler D.M. Confinement of electrons to quantum corrals on a metal surface. Science. 1993. Vol. 262, no. 5131. P. 218220.
3. Pham Van Dong, Kiyoshi Kanisava and Stefan Fölsch. Quantum rings engineered by atom manipulation. Phys Rev Lett. 2019. Vol. 123. P. 066801.
4. Vinasco J.A. Electronic states in Ga-As-(Al,GaA) eccentric quantum rings under nonresonant intense laser and magnetic fields. Scientific Reports. 2019. Vol. 9. P. 1427.I https://doi.org/10.1038/s41598-018-38114-0 .
5. Mugarza A., Shiller F., Kuntze J., Cordón J., Ruiz-Osés M. and Ortega J.E. Modelling nanostructures with vicinal surfaces. J. Phys.Condens. Matter. 2006. Vol. **18**. P. 27.
6. Garcia J.M. Intermixing and shape changes during the formation of InAs self-assembled quantum dots. Appl.Phys.Lett. 1997. Vol. 71. P. 2014-2016.
7. Climente J.I., Planelles J. Nanoscopic semiconductor quantum rings. Contributions to Science. 2007. Vol. 3, no. 4. P. 447-457. DOI:10.2436/20.7010.01.21.
8. Wang Yun-Ran, Im Sik Han and Mark Hopkinson. Fabrication of quantum dot and ring arrays by direct laser interference patterning for nanophotonics. Nanophotonics. 2023. Vol. 12, no. 8. P. 1469-1479. https://DOI.org/10.1515/nanoph-2022-0584 .
9. Crommie M.F., Lutz C.P., Eigle D.M., Heller E.J. Quantum corrals. Physica D. 1995. Vol. 83. P. 98-108.
10. Moghadasi Borogeni Fatemeh Enhanced thermoelectric properties in phosphorene nanorings. arXiv: 2212.10260v1 [cond-mat.mess-hall]. 20 Dec 2022.
11. Poole G.P., Owens F.J. Introduction to Nanotechnology. New York: John Wiley and Sons Inc., 2003. ISBN 0-471-0795-9. 330 p.
12. Bimberg D. Quanum dot heterostructures:fabticatio,properties,lasers (Review). Semiconductors. 1998. Vol. 32, no. 4. N 4. P. 343-457.
13. Bauzha O.S. Magnetic properties of quantum rings in the presence of spin-orbit and electron-electron interactions. Ukr. J. Phys. 2013. Vol. 58, no. 9. P. 888-893.
14. Panneerselvam Kaplana and Bhaskaran Muralidharan. Exciton magnetic polaron in CdTe/Cd 1-xMnxTe single semimagnetic quantum ring. arXiv:2212.14802v1 [cond-mat.mes-hall]. 30 Dec 2022
15. Culchac F.J., Porras-Montenegro N. and Latgé A. GaAs–(Ga, Al)As double quantum rings: confinement and magnetic field effects. Journal of Physics: Condensed Matter. 2008. Vol. 20, no. 28. DOI 10.1088/0953-8984/20.
16. Makhanets O.M. Spectral Parameters of an Exciton in Double Semiconductor Quantum Rings in an Electric Field. Journal of Nano- and Electronic Physics. 2021. Vol. 13, no. 2. P. 02024-02030.
17. Tahran Davood Hajia, Solaimani M. Persistent currents and electronic properties of Mandelbrot quantum rings. Scientific reports. 2023. Vol. 13. P. 5710. https://doi.org/10.1038/s41598-023-32905-w .
18. Berger Raphael J.F. The quantum mechanical problem of a particle on a ring with delta well. arXiv:2211.16149v1 [quant-ph]. 29 Nov 2022.
19. Abramowitz M., Irene A. Stegun Handbook of Mathematical Functions with formulas, graphs and mathematical tables. United States Department of Commerce, National Bureau of Standarts(NBS), 1964. 832 p.
20. Dos Santos Wytler Cordeiro Quantum problem of potential of a ring charged on the symmetry axis. arXiv:2304.10378v1 [quan-ph]. 17 Apr 2023.
21. Vakarchuk I.O. Quantum mechanics: textbook. Lviv: LNU named after Ivan Franko, 2012. 872 p.