

# Расчет зонной структуры массива сферических квантовых точек

С.И. Харитонов<sup>1,2</sup>, С.М.Р.Х. Хуссейн<sup>1,3</sup>, Н.Л. Казанский<sup>1</sup>, А.А. Фризе<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт систем обработки изображений РАН - филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Молодогвардейская 151, Самара, Россия, 443001

<sup>2</sup>Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Московское шоссе 34А, Самара, Россия, 443086

<sup>3</sup>University of Karbala, Karbala, Iraq, 56001

**Аннотация.** Квантово-размерные эффекты играют ключевую роль в оптоэлектронных свойствах квантовых точек [1]. Энергетический спектр квантовой точки принципиально отличается от объемного полупроводника. Электрон в нанокристалле ведет себя как в трехмерной потенциальной “яме”. Статья посвящена расчету зонной структуры линейного массива квантовых точек. В работе предложен метод расчета энергетического спектра линейного массива квантовых точек. Предложенный метод является развитием метода линейных присоединенных цилиндрических волн.

## 1. Введение

Квантовые точки были открыты в 1981-м году Алексеем Екимовым в прозрачной диэлектрической матрице [1]. Долгое время это открытие оставалось недооцененным, однако на данный момент оно имеет множество реализованных и возможных применений.

Квантово-размерные эффекты играют ключевую роль в оптоэлектронных свойствах квантовых точек [2]. Энергетический спектр квантовой точки принципиально отличается от объемного полупроводника. Электрон в нанокристалле ведет себя как в трехмерной потенциальной “яме”. Имеется несколько стационарных уровней энергии для электрона и дырки с характерным расстоянием между ними. Таким образом, энергетический спектр квантовой точки зависит от ее размера. Аналогично переходу между уровнями энергии в атоме, при переходе носителей заряда между энергетическими уровнями в квантовой точке может излучаться или поглощаться фотон. Частотами переходов, т.е. длиной волны поглощения или люминесценции, легко управлять, меняя размеры квантовой точки. Поэтому квантовые точки иногда называют «искусственными атомами». В терминах полупроводниковых материалов это можно назвать возможностью контроля эффективной ширины запрещенной зоны.

Зависимость энергетического спектра от размера дает огромный потенциал для практического применения квантовых точек. Квантовые точки могут найти применения в оптоэлектрических системах, таких как светоизлучающие диоды и плоские светоизлучающие панели, лазеры, ячейки солнечных батарей и фотоэлектрических преобразователей, как биологические маркеры, т.е. везде, где требуются варьируемые, перестраиваемые по длине волны оптические свойства.

Так, например, частицы сульфида кадмия с размерами порядка боровского радиуса экситона являются перспективными материалами для преобразования солнечной энергии в постоянный ток в солнечных батареях, а также в качестве люминофоров для белых светодиодов. Квантовые

точки на основе сульфида серебра, излучающие в ближней инфракрасной области спектра, могут использоваться для визуализации клеток и биологических тканей. Кроме того они могут найти применение в развивающейся области квантовых вычислений, являясь одним из способов реализации кубита.

Статья посвящена расчету зонной структуры линейного массива квантовых точек. В работе предложен метод расчета энергетического спектра линейного массива квантовых точек. Предложенный метод является развитием метода линейных присоединенных цилиндрических волн.

## 2. Метод присоединенных цилиндрических волн для расчета зонной структуры линейного массива квантовых точек

### 2.1 Решение задачи нахождения энергетического спектра квантового провода в рамках метода ЛЦПВ

Нужно найти собственные значения  $E(k)$ , гамильтониана  $\mathbf{H}$  с собственными функциями  $\Psi$

$$\mathbf{H}\Psi = E(k)\Psi \quad (1)$$

Представим функцию  $\Psi$  в виде разложения по базисным функциям (не всегда ортогональным), нумеруемым  $n_1, m_1, p_1$ :

$$\Psi = \sum f^{n_1 m_1 p_1} \Phi_{n_1 m_1 p_1}(k, r, \theta, \varphi), \quad (2)$$

$$\sum_{n_1 m_1 p_1} \mathbf{H} \Phi_{n_1 m_1 p_1}(k, r, \theta, \varphi) = E(k) \sum_{n_1 m_1 p_1} f^{n_1 m_1 p_1} \Phi_{n_1 m_1 p_1}(k, r, \theta, \varphi). \quad (3)$$

Умножим на  $\Phi^{n_2 m_2 p_2*}(k, r, \theta, \varphi)$

$$\begin{aligned} \sum_{n_1 m_1 p_1} f^{n_1 m_1 p_1} \Phi^{n_2 m_2 p_2*}(k, r, \theta, \varphi) \mathbf{H} \Phi_{n_1 m_1 p_1}(k, r, \theta, \varphi) = \\ = E(k) \sum_{n_1 m_1 p_1} f^{n_1 m_1 p_1} \Phi^{n_2 m_2 p_2*}(k, r, \theta, \varphi) \Phi_{n_1 m_1 p_1}(k, r, \theta, \varphi). \end{aligned} \quad (4)$$

И проинтегрируем

$$\begin{aligned} \sum_{n_1 m_1 p_1} f^{n_1 m_1 p_1} \int_{\Omega} \Phi^{n_2 m_2 p_2*}(k, r, \theta, \varphi) \mathbf{H} \Phi_{n_1 m_1 p_1}(k, r, \theta, \varphi) d\Omega = \\ = E \sum_{n_1 m_1 p_1} f^{n_1 m_1 p_1} \int_{\Omega} \Phi^{n_2 m_2 p_2*}(k, r, \theta, \varphi) \Phi_{n_1 m_1 p_1}(k, r, \theta, \varphi) d\Omega. \end{aligned} \quad (5)$$

Обозначим матричный элемент гамильтониана

$$H_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} = \int_{\Omega} \Phi^{n_2 m_2 p_2*}(k, r, \theta, \varphi) \mathbf{H} \Phi_{n_1 m_1 p_1}(k, r, \theta, \varphi) d\Omega, \quad (6)$$

скалярное произведение функций

$$S_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} = \int_{\Omega} \Phi^{n_2 m_2 p_2*}(k, r, \theta, \varphi) \Phi_{n_1 m_1 p_1}(k, r, \theta, \varphi) d\Omega, \quad (7)$$

$$\left( H_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} - E(k) S_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} \right) f^{n_1 m_1 p_1} = 0. \quad (8)$$

Для того чтобы система однородных уравнений имела ненулевое решение, нужно чтобы ее определитель был равен нулю:

$$\det \left( H_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} - E(k) S_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} \right) = 0.$$

### 2.2 Поле в вакуумной области

Уравнение Шредингера для собственных значений в цилиндрической системе в вакуумной области имеет вид

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial \Phi}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} + E \Phi = 0. \quad (9)$$

Применим метод разделения переменных для этого уравнения

$$\Phi(\rho, \varphi, z) = R(\rho) \exp(im\varphi) \exp(i(k + k_p)z), \quad (10)$$

где  $m = 0, 1, 2, \dots$

Радиальная функция  $R(\rho)$  удовлетворяет уравнению

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial R(\rho)}{\partial \rho} \right) - \frac{m^2}{\rho^2} R(\rho) + (K_{nm}^2) R(\rho) = 0, \quad (11)$$

$$K_{nm}^2 = E - (k + k_p)^2. \quad (12)$$

В формуле (12) волновой вектор  $k$  принадлежит одномерной зоне Бриллюэна:  $-\frac{\pi}{c} \leq k \leq \frac{\pi}{c}$ , а  $k_p = \frac{2\pi p}{d}$ , где  $d$  – расстояние между центрами соседних квантовых точек (период нанотрубки вдоль оси симметрии).

Решением радиального уравнения является функция Бесселя  $J_m$

$$R(\rho) = J_m(K_{nm}\rho), \quad (13)$$

Коэффициент  $K_{nm}$  находится из условия

$$J_m(K_{nm}\rho_c) = 0, \quad K_{nm}\rho_c = \nu_{nm}, \quad J_m(\nu_{nm}) = 0, \quad (14)$$

$\nu_{nm}$  –  $n$ -тый нуль  $m$ -той функции Бесселя,  $\rho_c$  – радиус квантового нанопровода.

Функция  $\Phi^{nmp}(\rho, \varphi, z)$  удовлетворяет уравнению нормировки

$$\int_0^a \int_0^{2\pi} \int_0^c |\Phi^{nmp}(\rho, \varphi, z)|^2 \rho d\rho d\varphi dz = 1. \quad (15)$$

Из уравнения (15) находим  $C^{nmp}$ . Запишем это уравнение в сферической системе координат с центром в центре квантовой точки

$$(\Phi_{II\alpha})_{nmp}(r, \theta, \varphi) = C^{nmp} J_m(K_{nm}r \sin \theta) \exp(im\varphi) \exp(iK_p r \cos \theta). \quad (16)$$

В отличие от функции внутри сферы эта функция удовлетворяет уравнению Шредингера.

### 2.3 Поле внутри квантовой точки

Рассмотрим теперь уравнение для квантовой точки с постоянной потенциальной энергией  $U$  внутри. Уравнение Шредингера для собственных значений в сферической системе имеет вид

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) - \frac{\mathbf{L}^2 \Phi}{r^2} + (E - U) \Phi = 0, \quad (17)$$

$\mathbf{L}^2$  – оператор квадрата момента количества движения [7].

Представим решение в виде

$$\Phi = u_l(r) Y_{lm}(\varphi, \theta). \quad (18)$$

Сферические функции  $Y_{lm}(\varphi, \theta)$  имеют вид

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = Q_{lm} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad (19)$$

здесь  $P_l^{|m|}$  – присоединенные функции Лежандра,  $Q_{lm}$  – нормировка:

$$Q_{lm} = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} i^{|m|} \left[ \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2}. \quad (20)$$

присоединенные функции Лежандра удовлетворяют условию ортогональности

$$\int_0^\pi P_l^{|m|}(\cos \theta) P_{l'}^{|m|}(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \left[ \frac{2}{2l+1} \frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!} \right] \delta_{ll'} = M_{lm} \delta_{ll'}, \quad (21)$$

$$M_{lm} = \left[ \frac{2}{2l+1} \frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!} \right]. \quad (22)$$

Уравнение для радиальной части волновой функции  $u_l(r)$  имеет вид

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial u_l(r)}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)u_l(r)}{r^2} + (E-U)u_l(r) = 0. \quad (23)$$

Потенциальная энергия отлична от нуля в области  $r < r_0$  и имеет отрицательное значение. Решение в первой области для радиальной части волновой функции имеет вид

$$u_l(r) = N^{u,l} j_l \left( \sqrt{(E_l - U)r} \right), \quad (24)$$

где  $j_l \left( \sqrt{(E_l - U)r} \right)$  – сферическая функция Бесселя,  $N^{u,l,n}$  – нормировочный коэффициент.

Для решения задачи в рамках метода присоединенных волн в качестве решения внутри точки используется следующая функция

$$\Phi_{l\alpha}(r, \varphi, \theta) = \sum_m \sum_l \left\{ A^{lm} u_l(E_l, r) + B^{lm} g_l(E_l, r) \right\} Y_{lm}(\varphi, \theta), \quad (25)$$

$$u_l(E_l, r) = N^{u,l} j_l \left( \sqrt{(E_l - U)r} \right), \quad g_l(E_l, r) = \frac{du_l(E_l, r)}{dE_l}. \quad (26)$$

#### 2.4 Сшивки на границе сферы и вакуумной области

Волновые функции в области между сферами имеют вид

$$\Phi_{ll\alpha}(r, \theta, \varphi) = F_{mp}(r, \theta) \exp(im\varphi), \quad (27)$$

$$F_{mp}(r, \theta) = C^{mm} J_m(K_{mp} r \sin \theta) \exp(iK_p r \cos \theta).$$

В области внутри сферы волновые функции имеют вид

$$\Phi_{l\alpha}(r, \varphi, \theta) = \sum_m \sum_l \left\{ A^{lm} u_l(E_l, r) + B^{lm} g_l(E_l, r) \right\} Y_{lm}(\varphi, \theta). \quad (28)$$

Производные функций (в вакуумной области)  $\Phi_{l\alpha}(r, \varphi, \theta)$  по радиусу имеют вид

$$\frac{d}{dr} \Phi_{l\alpha}(r, \theta, \varphi) = G_{mp}(r, \theta) \exp(im\varphi), \quad (29)$$

где функция  $G_{mp}(r, \theta)$  выражается следующим образом:

$$G_{mp}(r, \theta) = C^{mm} \frac{d}{dr} F_{mp}(r, \theta). \quad (30)$$

Производная от функции  $\Phi_{ll\alpha}(r, \varphi, \theta)$  (внутри атома или квантовой точки) по радиусу имеет вид

$$\frac{d}{dr} \Phi_{ll\alpha}(r, \varphi, \theta) = \sum_m \sum_l \left\{ A^{lm} u_l'(E, r) + B^{lm} g_l'(E, r) \right\} Y_{lm}(\varphi, \theta), \quad (31)$$

где функция  $g_l$  имеет вид

$$g_l(E_l, r) = \frac{du_l(E_l, r)}{dE}, \quad u_l(E_l, r) = N_{u,l} j_l \left( \sqrt{(E_l - U)r} \right). \quad (32)$$

Функции и их производные удовлетворяют уравнениям сшивки

$$\Phi_{l\alpha}(r_Q, \theta, \varphi) = \Phi_{ll\alpha}(r_Q, \theta, \varphi), \quad (33)$$

$$\frac{d}{dr} (\Phi_{l\alpha}(r_Q, \theta, \varphi)) = \frac{d}{dr} (\Phi_{ll\alpha}(r_Q, \theta, \varphi)). \quad (34)$$

Уравнение (33) сводится к функциональному уравнению

$$F_{mp}(r_Q, \theta) = \sum_l \left\{ A^{lm} u_l(E, r_Q) + B^{lm} g_l(E, r_Q) \right\} Q_{lm} P_l^{m|}(\cos \theta). \quad (35)$$

Далее умножая левую и правую часть на  $P_l^{lm}(\cos\theta)\sin\theta$ , интегрируем по углу  $\theta$ , учитывая ортогональность полиномов Лежандра. Аналогично проводим выкладки для производных по радиусу. Получаем систему уравнений

$$\left\{ A^{lm} u_l(E, r_Q) + B^{lm} g_l(E, r_Q) \right\} Q_{lm} M_{lm} = \int_0^\pi F_{nmp}(r_Q, \theta) P_l^{lm}(\cos\theta) \sin\theta d\theta, \quad (36)$$

$$\left\{ A^{lm} u_l'(E, r_Q) + B^{lm} g_l'(E, r_Q) \right\} Q_{lm} M_{lm} = \int_0^\pi G_{nmp}(r_Q, \theta) P_l^{lm}(\cos\theta) \sin\theta d\theta. \quad (37)$$

Базисные волновые функции зависят от четырех индексов  $nmp$ . Коэффициенты  $A^{lm}$  и  $B^{lm}$  выражаются через коэффициенты  $C^{nm}$  и становятся зависимыми от индексов  $np$ . В дальнейшем будем записывать  $B^{lm}(n, p)$ ,  $A^{lm}(n, p)$ .

Решаем систему линейных уравнений, получаем выражения для  $A^{lm}$  и  $B^{lm}$ .

### 2.5 Базисные волновые функции

Запишем волновую функцию  $\Phi_{nmp}(k, r, \theta, \varphi)$  в виде кусочной функции с учетом зависимости от координат в нанопроводе:

$$\Phi_{nmp}(k, r, \theta, \varphi) = \begin{cases} (\Phi_{I\alpha})_{nmp}(r, \theta, \varphi) & (x, y, z) \in \Omega_I \\ (\Phi_{II\alpha})_{nmp}(r, \theta, \varphi) & (x, y, z) \in \Omega_{II} \end{cases}. \quad (38)$$

Область  $\Omega_{II}$  – область между сферами (индекс  $II\alpha$  показывает на связь координат с центром сферы),  $\Omega_{I\alpha}$  – область внутри сферы индексом  $\alpha$ .

$$(\Phi_{II})_{nmp}(\rho, \varphi, z) = F_{nmp}(r, \theta) \exp(im\varphi) \quad (\rho, \varphi, z) \in \Omega_{II}. \quad (39)$$

Базисные волновые функции, имеющие непрерывные производные на поверхности сферы имеют вид

$$(\Phi_{II\alpha})_{nmp}(r, \theta, \varphi) = F_{nmp}(r, \theta) \exp(im\varphi) \quad (r, \varphi, \theta) \in \Omega_{I\alpha}, \quad (40)$$

$$(\Phi_{I\alpha})_{nmp}(r, \varphi, \theta) = \sum_l \left\{ A^{lm}(n, p) u_l(E_l, r) + B^{lm}(n, p) g_l(E_l, r) \right\} Y_{lm}(\varphi, \theta) \quad (r, \varphi, \theta) \in \Omega_{I\alpha}. \quad (41)$$

### 2.6 Вычисление интегралов перекрытия для квантового провода

Интеграл перекрытия  $S_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2}$  областей  $\Omega_{II}$  и  $\Omega_{I\alpha}$  имеет вид:

$$\begin{aligned} S_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} &= \int_{cell} \Phi_{n_2 m_2 p_2}^*(r, \theta, \varphi) \Phi_{n_1 m_1 p_1}(r, \theta, \varphi) dV = \\ &= \int_{\Omega_{I\alpha}} (\Phi_{I\alpha}^*)_{n_2 m_2 p_2}(r, \theta, \varphi) (\Phi_{I\alpha})_{n_1 m_1 p_1}(r, \theta, \varphi) dV + \int_{\Omega_{II}} (\Phi_{II}^*)_{n_2 m_2 p_2}(r, \theta, \varphi) (\Phi_{II})_{n_1 m_1 p_1}(r, \theta, \varphi) dV \end{aligned} \quad (42)$$

Интеграл по области вне сфер можно представить в виде разности интегралов

$$\int_{\Omega_{II}} dV = \int_{cell} dV - \int_{\Omega_{II\alpha}} dV, \quad (43)$$

где  $cell = \Omega_{II} \cup \Omega_{II\alpha}$

В результате получаем

$$S_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} = (S_{cell})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} - (S_{II\alpha})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} + (S_{I\alpha})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2}, \quad (44)$$

$$(S_{cell})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} = \int_{cell} (\Phi_{II}^*)_{n_2 m_2 p_2}(\rho, \varphi, z) (\Phi_{II})_{n_1 m_1 p_1}(\rho, \varphi, z) dV, \quad (45)$$

$$(S_{II\alpha})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} = \int_{\Omega_{II\alpha}} (\Phi_{II\alpha}^*)_{n_2 m_2 p_2}(r, \theta, \varphi) (\Phi_{II\alpha})_{n_1 m_1 p_1}(r, \theta, \varphi) dV, \quad (46)$$

$$(S_{I\alpha})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} = \int_{\Omega_{I\alpha}} (\Phi_{I\alpha}^*)_{n_2 m_2 p_2}(r, \theta, \varphi) (\Phi_{I\alpha})_{n_1 m_1 p_1}(r, \theta, \varphi) dV. \quad (47)$$

## 2.7 Вычисление матричных элементов гамильтониана для квантового провода

Рассмотрим матричный элемент гамильтониана:

$$H_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} = (H_{cell})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} - (H_{II\alpha})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} + (H_{I\alpha})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2}, \quad (48)$$

$$(H_{cell})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} = \int_{cell} \Phi_{II}^{n_2 m_2 p_2*}(k, \rho, \varphi, z) \mathbf{H}(\Phi_{II})_{n_1 m_1 p_1}(k, \rho, \varphi, z) d\Omega_{II}, \quad (49)$$

$$(H_{II\alpha})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} = \int_{\Omega_{I\alpha}} \Phi_{II\alpha}^{n_2 m_2 p_2*}(k, r, \theta, \varphi) \mathbf{H}(\Phi_{II\alpha})_{n_1 m_1 p_1}(k, r, \theta, \varphi) d\Omega_{I\alpha}, \quad (50)$$

$$(H_{I\alpha})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} = \int_{\Omega_{I\alpha}} \Phi_{I\alpha}^{n_2 m_2 p_2*}(k, r, \theta, \varphi) \mathbf{H}(\Phi_{I\alpha})_{n_1 m_1 p_1}(k, r, \theta, \varphi) d\Omega_{I\alpha}. \quad (51)$$

Во втором интеграле в функции  $\Phi_{II\alpha}^{n_2 m_2 p_2*}(k, r, \theta, \varphi)$  есть продолжение функции на область  $\Omega_{I\alpha}$ .

### 2.7.1 Действие гамильтониана на волновые функции в межсферной области

Найдем теперь действие оператора Гамильтона на базисные функции  $\Phi_{lmp}(r, \theta, \varphi)$ . Оператор

Гамильтона действует на функцию  $\Phi_{lmp}(r, \theta, \varphi)$ :

$$\mathbf{H}(\Phi_{II})_{lmp}(k, \rho, \varphi, z) = E_{lmp}(\Phi_{II})_{lmp}(k, \rho, \varphi, z), \quad (52)$$

$$\mathbf{H}(\Phi_{II\alpha})_{lmp}(k, r, \theta, \varphi) = E_{lmp}(\Phi_{II\alpha})_{lmp}(k, r, \theta, \varphi), \quad (53)$$

$$E_{lmp} = (K_{lm}^2 + K_p^2). \quad (54)$$

Интеграл по всей ячейке равен

$$(H_{cell})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} = \int_{cell} \Phi_{II}^{n_2 m_2 p_2*}(k, \rho, \varphi, z) \mathbf{H}(\Phi_{II})_{n_1 m_1 p_1}(k, \rho, \varphi, z) d\Omega_{II} = \quad (55)$$

$$= E_{n_1 m_1 p_1} \int_{cell} \Phi_{II}^{n_2 m_2 p_2*}(k, \rho, \varphi, z) (\Phi_{II})_{n_1 m_1 p_1}(k, \rho, \varphi, z) d\Omega_{II},$$

$$(H_{cell})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} = E_{n_1 m_1 p_1} (S_{cell})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2}. \quad (56)$$

Интеграл по области внутри сферы с номером  $\alpha$  равен

$$(H_{II\alpha})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} = \int_{\Omega_{I\alpha}} \Phi_{II\alpha}^{n_2 m_2 p_2*}(k, r, \theta, \varphi) \mathbf{H}(\Phi_{II\alpha})_{n_1 m_1 p_1}(k, r, \theta, \varphi) d\Omega_{I\alpha} = \quad (57)$$

$$= E_{n_1 m_1 p_1} \int_{\Omega_{I\alpha}} \Phi_{II\alpha}^{n_2 m_2 p_2*}(k, r, \theta, \varphi) (\Phi_{II\alpha})_{n_1 m_1 p_1}(k, r, \theta, \varphi) d\Omega_{I\alpha},$$

$$(H_{II\alpha})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} = E_{n_1 m_1 p_1} (S_{II\alpha})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2}.$$

### 2.7.2 Действие гамильтониана на волновые функции внутри квантовой точки

Для того чтобы подействовать оператором Гамильтона на функцию  $\Phi_{2nmp_l}(r, \varphi, \theta)$ , необходимо знать действие радиальной части гамильтониана на функции  $u_l(E, r)$ ,  $g_l(E, r)$ .

Функция  $u_l(E, r)$  удовлетворяет уравнению

$$\left\{ -\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial u_l(E, r)}{\partial r} \right) + \frac{l(l+1)}{r^2} u_l(E, r) \right\} + U u_l(E, r) = E u_l(E, r). \quad (58)$$

Функция  $g_l(E, r)$  удовлетворяет уравнению

$$\left\{ -\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial g_l(E, r)}{\partial r} \right) + \frac{l(l+1)}{r^2} g_l(E, r) \right\} + U g_l(E, r) = u_l(E, r) + E g_l(E, r), \quad (59)$$

$$\mathbf{H} u_l(E, r) Y_{lm}(\theta, \varphi) = E_l u_l(E, r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (60)$$

$$\left\{ -\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial g_l(E, r)}{\partial r} \right) + \frac{l(l+1)}{r^2} g_l(E, r) \right\} Y_{lm}(\theta, \varphi) + U g_l(E, r) Y_{lm}(\theta, \varphi) = \quad (61)$$

$$= u_l(E, r) Y_{lm}(\theta, \varphi) + E g_l(E, r) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

В результате получаем, что действие гамильтониана на часть волновой функции, которая содержит функцию  $g_l(E, r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$

$$\mathbf{H} g_l(E, r) Y_{lm}(\theta, \varphi) = u_l(E, r) Y_{lm}(\theta, \varphi) + E g_l(E, r) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Предварительно получаем

$$\mathbf{H}(\Phi_{I\alpha})_{nmp}(r, \varphi, \theta) = \sum_l \left\{ A^{lm} \mathbf{H} u_l(E, r) Y_{lm}(\varphi, \theta) + B^{lm} \mathbf{H} [g_l(E, r) Y_{lm}(\varphi, \theta)] \right\}. \quad (62)$$

Подставляя предыдущие уравнения

$$\mathbf{H}(\Phi_{I\alpha})_{nmp}(r, \varphi, \theta) = \sum_l \left\{ A^{lm}(n, p) E_l u_l(E, r) + B^{lm}(n, p) (u_l(E, r) + E_l g_l(E, r)) \right\} Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (63)$$

### 2.7.3 Матричный элемент внутри квантовой точки

Запишем теперь заготовку для вычисления матричного элемента

$$\begin{aligned} (H_{I\alpha})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} &= \int_{\Omega_{I\alpha}} (\Phi_{I\alpha}^*)_{n_2 m_2 p_2} \mathbf{H}(\Phi_{I\alpha})_{n_1 m_1 p_1} d\Omega_{I\alpha} = \\ &= \int \sum_l \left\{ A^{*l m_2}(n_2, p_2) u_l^*(E_l, r) + B^{*l m_2}(n_2, p_2) g_l^*(E_l, r) \right\} Y_{l m_2}^*(\varphi, \theta) \times \\ &\times \sum_l \left\{ A^{l m_1}(n_1, p_1) E_l u_l(E_l, r) + B^{l m_1}(n_1, p_1) (u_l(E_l, r) + E_l g_l(E_l, r)) \right\} Y_{l m_1}(\theta, \varphi) dV. \end{aligned} \quad (64)$$

Интегрирование по объему квантовой точки можно представить в виде

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_{I\alpha}} \Phi(r) Y_{l m_2}^*(\varphi, \theta) Y_{l m_1}(\theta, \varphi) d\Omega_{I\alpha} &= \int_0^{r_\alpha} \Phi(r) r^2 dr \int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{l m_2}^*(\varphi, \theta) Y_{l m_1}(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi, \\ \int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{l m_2}^*(\varphi, \theta) Y_{l m_1}(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi &= \delta_{l l'} \delta_{m_1 m_2}. \end{aligned}$$

Отдельно перемножим

$$\begin{aligned} (H_{I\alpha})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} &= \\ &= A^{*l m_2}(n_2, p_2) A^{l m_1}(n_1, p_1) \delta_{l l'} \delta_{m_1 m_2} E_l \int_0^{r_\alpha} u_l^*(E_l, r) u_l(E_l, r) r^2 dr + \\ &+ B^{*l m_2}(n_2, p_2) A^{l m_1}(n_1, p_1) E_l \delta_{l l'} \delta_{m_1 m_2} \int_0^{r_\alpha} g_l^*(E_l, r) u_l(E_l, r) r^2 dr + \\ &+ A^{*l m_2}(n_2, p_2) B^{l m_1}(n_1, p_1) \delta_{l l'} \delta_{m_1 m_2} \int_0^{r_\alpha} u_l^*(E_l, r) u_l(E_l, r) r^2 dr + \\ &+ A^{*l m_2}(n_2, p_2) B^{l m_1}(n_1, p_1) E_l \delta_{l l'} \delta_{m_1 m_2} \int_0^{r_\alpha} u_l^*(E_l, r) g_l(E_l, r) r^2 dr + \\ &+ B^{*l m_2}(n_2, p_2) B^{l m_1}(n_1, p_1) \delta_{l l'} \delta_{m_1 m_2} \int_0^{r_\alpha} g_l^*(E_l, r) u_l(E_l, r) r^2 dr + \\ &+ B^{*l m_2}(n_2, p_2) B^{l m_1}(n_1, p_1) E_l \delta_{l l'} \delta_{m_1 m_2} \int_0^{r_\alpha} g_l^*(E_l, r) g_l(E_l, r) r^2 dr. \end{aligned} \quad (65)$$

### 2.8 Сводка основных формул

Система уравнений для  $A^{lm}$   $B^{lm}$ :

$$\left\{ A^{lm} u_l(E, r_Q) + B^{lm} g_l(E, r_Q) \right\} Q_{l,m} M_{l,m} = \int_0^\pi F_{nmp}(r_Q, \theta) P_l^{|m|}(\cos\theta) \sin\theta d\theta, \quad (66)$$

$$\left\{ A^{lm} u_l'(E, r_Q) + B^{lm} g_l'(E, r_Q) \right\} Q_{l,m} M_{l,m} = \int_0^\pi G_{nmp}(r_Q, \theta) P_l^{|m|}(\cos\theta) \sin\theta d\theta. \quad (67)$$

Для интегралов перекрытия получены формулы:

$$S_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} = (S_{cell})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} - (S_{II\alpha})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} + (S_{I\alpha})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2}, \quad (68)$$

$$(S_{cell})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} = 2\pi d |C^{n_1 m_1}|^2 \left\{ \int_0^{\rho_c} J_{m_1}(K_{n_1 m_1} \rho) J_{m_1}(K_{n_2 m_2} \rho) \rho d\rho \right\} \delta_{n_1}^{n_2} \delta_{m_1}^{m_2} \delta_{p_1}^{p_2}, \quad (69)$$

$$(S_{II\alpha})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} = 2\pi C^{*n_2 m_2} C^{n_1 m_1} \delta_{m_1}^{m_2} \times \quad (70)$$

$$\times \int_0^{\rho_c} \int_0^{\pi} J_{m_1}(K_{n_2 m_2} r \sin \theta) J_{m_1}(K_{n_1 m_1} r \sin \theta) \exp(i(K_{p_1} - K_{p_2}) r \cos \theta) r^2 \sin \theta dr d\theta$$

$$(S_{I\alpha})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} = \sum_l A^{lm*} A^{lm} + B^{lm*} B^{lm} N_{lm}. \quad (71)$$

Для матричных элементов справедливы формулы:

$$H_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} = (H_{cell})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} - (H_{II\alpha})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} + (H_{I\alpha})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2}, \quad (72)$$

$$(H_{cell})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} = E_{n_1 m_1 p_1} (S_{cell})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2}, \quad (73)$$

$$(H_{II\alpha})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} = E_{n_1 m_1 p_1} (S_{II\alpha})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2}, \quad (74)$$

$$(H_{I\alpha})_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} = A^{*l m_1}(n_2, p_2) A^{l m_1}(n_1, p_1) \delta_{m_1 m_2} E_l + B^{*l m_2}(n_2, p_2) B^{l m_1}(n_1, p_1) E_l \delta_{m_1 m_2} N_{l\alpha}$$

$$+ A^{*l m_2}(n_2, p_2) B^{l m_1}(n_1, p_1) \delta_{m_1 m_2}. \quad (75)$$

Энергетический спектр находится из решения уравнения:

$$\det \left( H_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} - E(k) S_{n_1 m_1 p_1}^{n_2 m_2 p_2} \right) = 0. \quad (76)$$

### 3. Заключение

В работе предложен метод нахождения энергетического спектра носителей заряда для линейного массива квантовых точек. Предложенный метод отличается способом расчета матричных элементов гамильтониана. Это позволяет снизить вычислительную сложность задачи. Метод позволяет рассчитывать энергетический спектр не только линейного массива квантовых точек, но и более сложных структур, состоящих из квантовых точек.

### 4. Благодарности

Работа выполнена при поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований № 18-07-00514.

### 5. Литература

- [1] Екимов, А.И. Квантовый размерный эффект в трехмерных микрокристаллах полупроводников / А.И. Екимов, А.А. Онущенко // Письма в ЖЭТФ. – 1981. – Т. 34. – С. 363-366.
- [2] Klimov, V. Semiconductor and metal nanocrystals – New York, Marcel Dekker Inc., 2004.
- [3] Klimov, V.I. Optical Nonlinearities and Ultrafast Carrier Dynamics in Semiconductor Nanocrystals // J. Phys. Chem. B. – 2000. – Vol. 104. – P. 6112-6123.
- [4] Neuhauser, R.G. Correlation between fluorescence intermittency and spectral diffusion in single semiconductor quantum dots / R.G. Neuhauser, K.T. Shimizu, W.K. Woo, S.A. Empedocles, M.G. Bawendi // Phys. Rev. Lett. – 2000. – Vol. 85(15). – P. 3301-3304.
- [5] Murray, C.B. Synthesis and characterization of nearly monodisperse CdE (E=S, Se, Te) semiconductor nanocrystallites / C.B. Murray, D.J. Norris, M.G. Bawendi // J. Am. Chem. Soc. – 1993. – Vol. 115. – P. 8706.
- [6] Murray, C.B. Colloidal synthesis of nanocrystals and nanocrystal superlattices IBM / C.B. Murray, S. Sun, W. Gaschler, H. Doyle, T.A. Betley, C.R. Kagan // J. Res. Dev. – 2001. – Vol. 45. – P. 47-55.
- [7] Давыдов, А.С. Квантовая механика: учеб. пособие – СПб.: БХВ-Петербург, 2011. – 704 с.

## Calculation of the band structure of an array of spherical quantum dots

S.I. Kharitonov<sup>1,2</sup>, S.M.R.H. Hussein<sup>1,3</sup>, N.L. Kazanskiy<sup>1</sup>, A.A. Frize<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Image Processing Systems Institute of RAS - Branch of the FSRC "Crystallography and Photonics" RAS, Molodogvardejskaya street 151, Samara, Russia, 443001

<sup>2</sup>Samara National Research University, Moskovskoe Shosse 34A, Samara, Russia, 443086

<sup>3</sup>University of Karbala, Karbala, Iraq, 56001

**Abstract.** Quantum-dimensional effects play a key role in the optoelectronic properties of quantum dots [1]. The energy spectrum of a quantum dot is fundamentally different from that of a bulk semiconductor. An electron in a nanocrystal behaves like a three-dimensional potential "pit". The article is devoted to the calculation of the zone structure of a linear array of quantum dots. A method for calculating the energy spectrum of a linear array of quantum dots is proposed. The proposed method is a development of the method of linear attached cylindrical waves.