

PACS: 79.60.Gv

DOI: <https://doi.org/10.18524/1815-7459.2025.2.330121>

ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ ГЕОМЕТРІЇ КВАНТОВОЇ МОЛЕКУЛИ НА ЕЛЕКТРОННІ СТАЦІОНАРНІ СТАНИ

*В. Б. Гольський, <https://orcid.org/0009-0003-7282-8050>**Р. Я. Лешко, <https://orcid.org/0000-0002-9072-164X>**В. Р. Карпій,**К. В. Гольський*

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,
кафедра фізики та інформаційних систем,
вул. Стрийська, 3, м. Дрогобич, Україна, e-mail: hol.wit@dspu.edu.ua

Анотація. Робота присвячена дослідженню квантової молекули, яка утворено з трьох сферичних квантових точок, які розміщені вздовж однієї прямої. Проаналізовано геометрію лінійної квантової молекули, яка утворена з трьох сферичних нанокристалів. Вибрано для дослідження чотири випадки розміщення. Отримано дисперсійне рівняння для дослідження енергетичного спектру електрона в лінійній квантовій молекулі з трьох сферичних квантових точок. Проаналізовано вплив відстані між квантовими точками та розмірів квантової точки на енергетичний спектр в симетричній КТ. Для порівняння було використано метод скінчених елементів, який підтвердив якісну картину результатів та дав можливість проаналізувати густину ймовірності та ймовірність перебування електрона в лінійній квантовій молекулі. Результати показують, що можна керувати місцем перебування електрона надавши йому певні значення енергії.

Ключові слова: квантова молекула, енергетичний спектр електрона, ймовірність перебування частинки

Вступ

Напівпровідникові квантові точки (КТ) є перспективною основою для опрацювання квантової інформації в пристроях на базі твердого тіла [1-2]. Конфігурація КТ вирізняється перевагами при реалізації квантових бітів (кубітів), зокрема завдяки відносно тривалому часу збереження когерентності спіну електрона, перспективам масштабування за рахунок усталених технологій виробництва та компактним фізичним розмірам на один кубіт. На сьогоднішній день КТ із заданими характеристиками були об'єднані у квантові молекули (КМ) різної складності: подвійні [3], утворені з трьох [2], чотирьох [4] та п'яти нанокристалів [5], з метою збільшення кількості кубітів. Багатоточкові структури також використовуються для дослідження електронної взаємодії, як-от

у квантових клітинних автоматах [2], моделі Фермі-Хаббарда [6] та у випадках негативного обмінного зв'язку [7].

Зростання кількості наночастинок у квантовій молекулі переводить таку наносистему у структуру надґратки на основі КТ. Такі конфігурації були проаналізовані в дослідженнях [8-9], де вивчались енергетичні рівні та оптичні характеристики. Зокрема проаналізовано випадки надґратки КТ з двома різними КТ у базисі надґратки. Автори розглянули спектр енергетичних рівнів електронів для $1s$ - та трьох $1p$ -підзон у залежності від розмірів квантових точок. Також було розраховано коефіцієнт міжзонного поглинання лінійно поляризованого світла в одновимірному масиві впорядкованих сферичних КТ.

Теоретичний аналіз КМ, складеної з двох КТ різної форми: циліндричної, кубічної та

сферичної було здійснено в роботах [10-12]. Для кожної геометрії було знайдено аналітичні розв'язки рівняння Шредінгера з урахуванням реального енергетичного бар'єру на межі матеріалів. Отримано енергетичні спектри електрона в залежності від розмірів та відстані між КТ, що пояснюється явищем тунелювання між точками.

У роботі [13] розглянуто вплив скінченного розриву зон між середовищами та просторових обмежень у КМ з трьох КТ, центри яких утворюють трикутник. Для опису електронного стану було використано метод лінійної комбінації квантових ямних орбіталей. Робота [14] присвячена впливу деформацій в аналогічній КМ. Недослідженими залишається енергетичні спектри електрона у КМ з трьох КТ, в якій нанокристали розміщені вздовж однієї прямої. Саме цьому питанню присвячена ця робота.

2. Аналіз геометрії лінійної молекули, що утворена з трьох КТ

Розглянемо геометрію квантової молекули із трьох сферичних нанокристалів, центри яких розміщені на одній прямій. В загальному випадку розміри КТ (R_1, R_2, R_3) та відстані (d_1, d_2) між межами їх поділу можуть бути різними. Проте найбільший інтерес викликають симетричні випадки, оскільки в них можуть проявлятися специфічні фізичні особливості.

Спочатку розглянемо випадок, коли розміри квантових точок ($R_1 = R_2 = R_3$) і відстані між їхніми поверхнями ($d_1 = d_2$) однакові (Рис. 1.а). За таких умов можливі дві ситуації: сталий розмір нанокристалів при одночасній зміні відстані між нанокристалами, або одночасна зміна величини нанокристала при сталій відстані між їхніми поверхнями. Якщо ж зафіксувати розміри усіх трьох КТ ($R_1 = R_2 = R_3$)

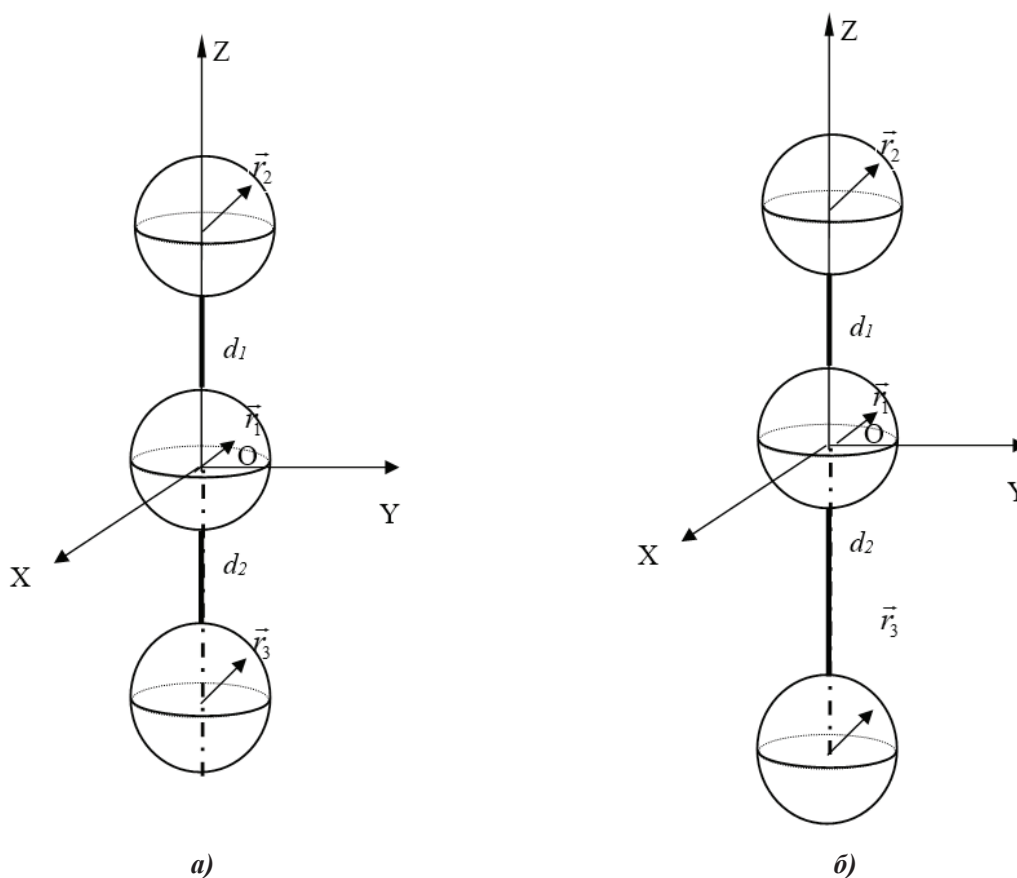


Рис. 1. Схема лінійної КМ: а) симетричне розміщення КТ; б) несиметричний випадок із «рухомою» однією з крайніх КТ.

та відстані ($d_l = \text{const}$) між середньою і однією із крайніх КТ (Рис 1.6), то отримаємо можливість змінювати відстань від іншої КТ до цієї пари.

Ще два варіанти частково симетричного розташування нанокристалів у квантовій матриці можна реалізувати шляхом зміни їх розмірів при незмінній відстані між ними

($d_l = d_2$). В одному випадку можна залишити фіксованими розміри двох крайніх КТ ($R_l = R_3 = \text{const}$) і змінювати величину центрального нанокристалу (R_2) (Рис. 2.а). Для іншого ж випадку, радіус центрального залишається без змін ($R_2 = \text{const}$), а змінюються розміри крайніх нанокристалів, при цьому вони мають однаковий розмір ($R_l = R_3$) (Рис.2.б).

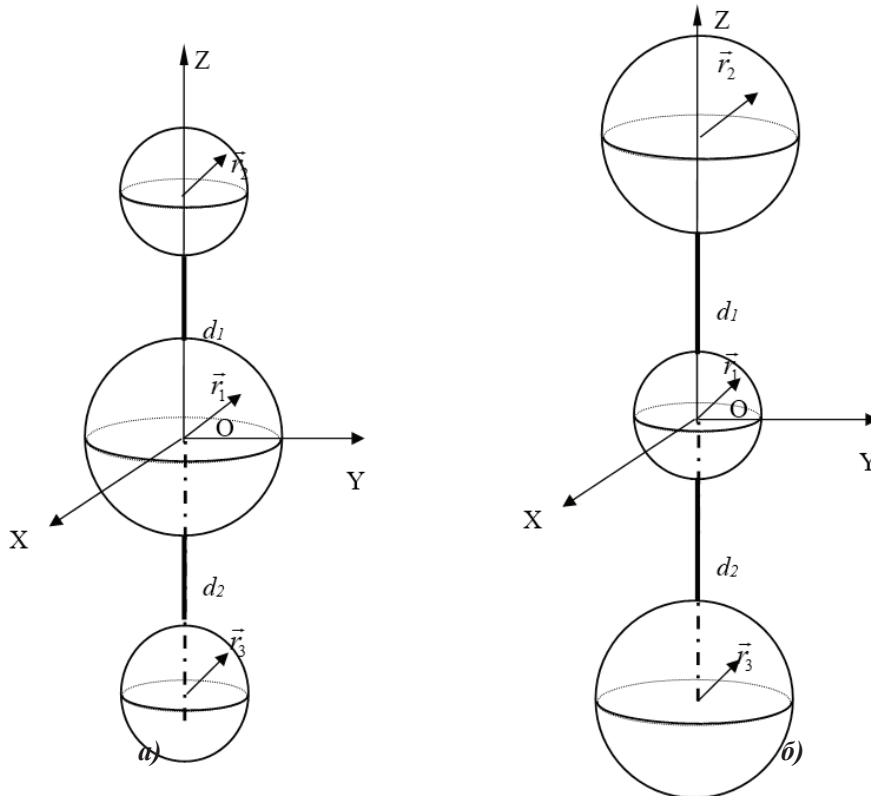


Рис. 2. Схема КМ із фіксованими відстанями між межами поділу КТ:
а) змінна величина середнього нанокристала, при сталих розмірах двох крайніх;
б) зміні величини крайніх нанокристалів, при сталих розмірах середнього.

3. Постановка та розв'язок задачі

Розглянемо лінійну квантову молекулу з трьох сферичних КТ, що розміщені вздовж прямої. Систему координат виберемо так, щоб центри КТ лежали на осі OZ , а точка O знаходилась в центрі середньої КТ (Рис. 1-2).

Гамільтоніан електрона в наближенні ефективної маси для даної гетеросистеми має вигляд:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m} \nabla + U(r), \quad (1)$$

де

$$U(r) = \begin{cases} 0, & \text{якщо } r \text{ пробігає область матриці} \\ U_0, & \text{якщо } r \text{ знаходить в області КТ} \end{cases}, \quad (2)$$

m – ефективна маса електрона для відповідної області, $U_0 < 0$.

Розв'яжемо задачу в наближенні лінійної комбінації орбіталей квантових ям. Для цьо-

го хвильову функцію представлено як лінійну комбінацію хвильових функцій електрона окремих КТ:

$$\Psi(r) = C_1 \Psi_1(r) + C_2 \Psi_2(r) + C_3 \Psi_3(r), \quad (3)$$

де $\Psi_i(r)$ – хвильова функція основного стану i -ої КЯ ($i = 1, 2, 3$), які з переведенням в декартову систему координат мають вигляд:

$$\Psi_1(x, y, z) = \begin{cases} A_1 \frac{\sin k \sqrt{x^2 + y^2 + (z - a_1)^2}}{\sqrt{x^2 + y^2 + (z - a_1)^2}}, & \text{для } x^2 + y^2 + (z - a_1)^2 \leq R_1^2 \\ B_1 \frac{\exp(-\chi \sqrt{x^2 + y^2 + (z - a_1)^2})}{\sqrt{x^2 + y^2 + (z - a_1)^2}}, & \text{для } x^2 + y^2 + (z - a_1)^2 > R_1^2 \end{cases},$$

$$\Psi_2(x, y, z) = \begin{cases} A_2 \frac{\sin k \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}, & \text{для } x^2 + y^2 + z^2 \leq R_2^2 \\ B_2 \frac{\exp(-\chi \sqrt{x^2 + y^2 + z^2})}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}, & \text{для } x^2 + y^2 + z^2 > R_2^2 \end{cases},$$

$$\Psi_3(x, y, z) = \begin{cases} A_3 \frac{\sin k \sqrt{x^2 + y^2 + (z - a_2)^2}}{\sqrt{x^2 + y^2 + (z - a_2)^2}}, & \text{для } x^2 + y^2 + (z - a_2)^2 \leq R_3^2 \\ B_3 \frac{\exp(-\chi \sqrt{x^2 + y^2 + (z - a_2)^2})}{\sqrt{x^2 + y^2 + (z - a_2)^2}}, & \text{для } x^2 + y^2 + (z - a_2)^2 > R_3^2 \end{cases}$$

$$a_1 = R_1 + R_2 + d_1, \quad a_2 = R_3 + R_2 + d_2,$$

$$k_i = \sqrt{\frac{2m_i}{\hbar^2} |U_0 - E_i^{one}|}, \quad \chi_i = \sqrt{\frac{2m_i}{\hbar^2} |E_i^{one}|},$$

$$A_i = \frac{1}{\sqrt{\frac{R_i}{2} - \frac{\sin(k_i R_i)}{4k_i} + \frac{\sin^2(k_i R_i)}{2\chi_i}}}, \quad B_i = \frac{\sin(k_i R_i)}{\exp(-\chi_i R_i)}.$$

R_i – радіус i -ої КТ, E_i^{one} – енергія електрона в i -й ізольованій КТ.

Якщо підставити (3) в стаціонарне рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (1), отримаємо:

$$\hat{H}(C_1 \Psi_{1s}(r) + C_2 \Psi_{2s}(r) + C_3 \Psi_{3s}(r)) = E(C_1 \Psi_{1s}(r) + C_2 \Psi_{2s}(r) + C_3 \Psi_{3s}(r)). \quad (4)$$

Помножимо (4) зліва спочатку на $\Psi_1^*(x, y, z)$, потім $\Psi_2^*(x, y, z)$ і $\Psi_3^*(x, y, z)$ та про інтегруємо по всьому просторі:

$$\begin{cases} C_1 H_{11} + C_2 H_{12} + C_3 H_{13} = EC_1 S_{11} + EC_2 S_{12} + EC_3 S_{13}, \\ C_1 H_{21} + C_2 H_{22} + C_3 H_{23} = EC_1 S_{21} + EC_2 S_{22} + EC_3 S_{23}, \\ C_1 H_{31} + C_2 H_{32} + C_3 H_{33} = EC_1 S_{31} + EC_2 S_{32} + EC_3 S_{33}, \end{cases} \quad (5)$$

де $H_{ij} = \int \Psi_i^*(x, y, z) \hat{H} \Psi_j(x, y, z) dx dy dz$,
 $S_{ij} = \int \Psi_i(x, y, z) \Psi_j(x, y, z) dx dy dz$
 $i, j = 1, 2, 3$.

Перенесемо усе з правої частини рівнянь системи (5) в ліву та згрупуємо по коефіцієнтах C_i . Отримаємо систему рівнянь з невідомими коефіцієнтами хвильової функції (3):

$$\begin{cases} C_1 (H_{11} - ES_{11}) + C_2 (H_{12} - ES_{12}) + C_3 (H_{13} - ES_{13}) = 0, \\ C_1 (H_{21} - ES_{21}) + C_2 (H_{22} - ES_{22}) + C_3 (H_{23} - ES_{23}) = 0, \\ C_1 (H_{31} - ES_{31}) + C_2 (H_{32} - ES_{32}) + C_3 (H_{33} - ES_{33}) = 0. \end{cases} \quad (6)$$

Оскільки $S_{11} = S_{22} = S_{33} = 1$ згідно умови нормування хвильових функцій окремих КТ, система набере остаточного вигляду:

$$\begin{cases} C_1 (H_{11} - E) + C_2 (H_{12} - ES_{12}) + C_3 (H_{13} - ES_{13}) = 0, \\ C_1 (H_{21} - ES_{21}) + C_2 (H_{22} - E) + C_3 (H_{23} - ES_{23}) = 0, \\ C_1 (H_{31} - ES_{31}) + C_2 (H_{32} - ES_{32}) + C_3 (H_{33} - E) = 0. \end{cases} \quad (7)$$

Як відомо з курсу лінійної алгебри, система однорідних рівнянь має розв'язок, відмінний від нульового, коли детермінант цієї системи дорівнює нулю:

$$\begin{vmatrix} (H_{11} - E) & (H_{12} - ES_{12}) & (H_{13} - ES_{13}) \\ (H_{21} - ES_{21}) & (H_{22} - E) & (H_{23} - ES_{23}) \\ (H_{31} - ES_{31}) & (H_{32} - ES_{32}) & (H_{33} - E) \end{vmatrix} = 0. \quad (8)$$

Дисперсійним рівнянням для електрона в КМ, що утворена з трьох сферичних КТ буде рівняння (8), яке розв'язано чисельно.

4. Аналіз результатів

Дослідження зосереджене на вивченні стаціонарних станів електрона в молекулі, що утворена з КТ сферичної форми системи *GaAs*/*AlAs*. Ефективна маса електрона у цих матеріалах складає $m_{GaAs} = 0.063m_0$ та $m_{AlAs} = 0.15m_0$, де m_0 – маса вільного електрона. А розрив зон в даній гетеросистемі, що визначає глибину потенціальної ями, дорівнює 560 *meV*. Розглянемо КТ таких розмірів, щоби в них існував один зв'язаний електронний стан. Діапазон радіусів таких нанокристалів обраної системи повинен

змінюватись від 14.1 до 25.4 $\text{\AA}$ ⁰, що приблизно становить 2.5 – 4.5 сталих ґратки *GaAs* ($a_{GaAs}^0 = 5.65 \text{\AA}$).

Симетричні випадки розміщення нанокристалів в КМ продемонстровані рисунками 3 і 4. Енергію електрона як функцію відстані між поверхнями КТ наведено на Рис. 3. Розміри усіх нанокристалів складали 3,5 сталих ґратки *GaAs* ($R_1 = R_2 = R_3 = 19.8 \text{\AA}$ ⁰), а відстань $d_1 = d_2 = n_a \cdot a_{AlAs}$ між межами поділу змінювалась

від 2 до 10 сталих ґратки $AlAs$ ($a_{AlAs} = 5.66 \text{ \AA}$). В цьому випадку КМ характеризується трьома рівнями, які із збільшенням відстані зливаються в один, що відповідає енергії електрона в ізольованій КТ. Величина розщеплення енергій основного і першого збудженого станів $\Delta E_{0,1} = 20.5 \text{ меВ}$ для $d_1 = d_2 = 2a_{AlAs}$ ($n_a = 2$), а між енергіями першим і другим збудженими станами – $\Delta E_{1,2} = 25.6 \text{ меВ}$. Якщо відстань становить $6a_{AlAs}$ то $\Delta E_{0,1} = 2.6 \text{ меВ}$, а $\Delta E_{1,2} = 2.7 \text{ меВ}$.

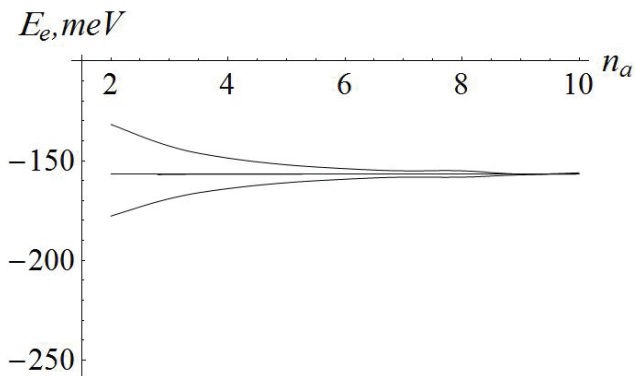


Рис. 3. Енергетичний спектр електрона в симетричній лінійній КМ в залежності від відстані між КТ (n_a – визначає відстань в сталих ґратках $AlAs$).

Другий симетричний випадок демонструє залежність енергії електрона в лінійній КМ в залежності від розмірів КТ при фіксованій відстані $d_1 = d_2 = 3a_{AlAs}$ (Рис. 4). Як видно із графіка, збільшення розмірів нанокристалів, що складають лінійну КМ призводить зменшення величини розщеплення, як між енергетичними рівнями основного і першого збуджених станів, так і між енергетичними рівнями збуджених станів. Коли радіус КТ дорівнює 2.5 сталих ($n_R = 2.5$) ґратки $GaAs$ ($R_1 = R_2 = R_3 = 14.1 \text{ \AA}$), то $\Delta E_{0,1} = 19.6 \text{ меВ}$ і $\Delta E_{1,2} = 33.1 \text{ меВ}$. При збільшенні радіуса до 4.5 сталих ґратки $GaAs$ ($R_1 = R_2 = R_3 = 25.4 \text{ \AA}$) – $\Delta E_{0,1} = 6.4 \text{ меВ}$, а $\Delta E_{1,2} = 7.1 \text{ меВ}$.

Перейдемо до несиметричних випадків. В першому (Рис. 5) розміри КТ були однакові і становили 3.5 сталих ґратки $GaAs$. Дві фіксовані КТ знаходились на відстані $d_1 = 3a_{AlAs}$.

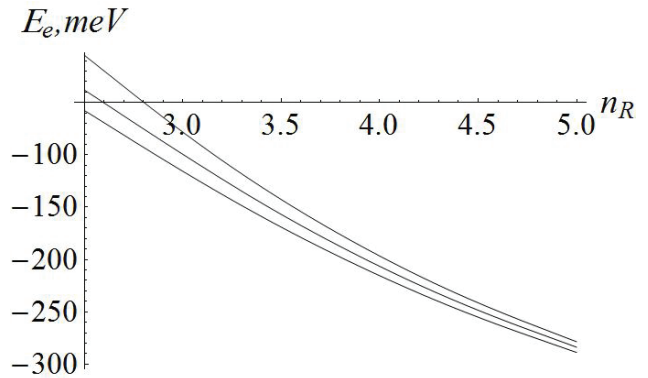


Рис. 4. Енергетичний спектр електрона в симетричній лінійній КМ в залежності від розмірів КТ (n_R – визначає радіус нанокристалу в сталих ґратки $GaAs$).

Відстань d_2 між середньою та іншою крайньою КТ змінювалась від $n_a = 2$ до $n_a = 10$. В цьому випадку система характеризується трьома станами енергій електрона для будь яких відстаней. Енергія першого збудженого стану практично не міняється. А енергія основного стану спочатку зростає і виходить на насичення при відстані $n_a = 5$. Протилежна ситуація із другим збудженим станом, який спадає і виходить на насичення при тій же відстані n_a . Різниці енергій між рівнями для $d_2 = 2a_{AlAs}$ становлять $\Delta E_{0,1} = 17 \text{ меВ}$ і $\Delta E_{1,2} = 20.4 \text{ меВ}$, а коли $d_2 = 5a_{AlAs}$ – $\Delta E_{0,1} = 9.4 \text{ меВ}$ і $\Delta E_{1,2} = 10.3 \text{ меВ}$.

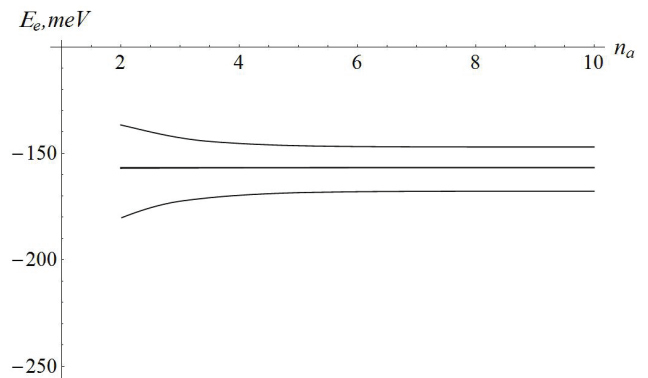


Рис. 5. Енергетичний спектр електрона в несиметричній лінійній КМ (дві КТ фіксовані) в залежності від відстані третьої КТ до двох інших.

В двох наступних випадках фіксованими були відстані між межами КТ, що утворюють молекулу, а їх розміри змінювались. На Рис. 6. радіус центрального нанокристала становив

$R_2 = 3.5a_{GaAs}$ змінювались розміри двох крайніх. Відстань між межами КТ становила $d_1 = d_2 = 3a_{AlAs}$. У випадку ($R_1 = R_3 = 2.5a_{GaAs} = 14.1 \text{ \AA}$) система характеризується трьома енергетичними рівнями: основним та двома збудженими. Найнижчий рівень виникає внаслідок середньої КТ, а два збуджені близькі до стаціонарного стану електрона в двох крайніх нанокристалах. Проте зміщенні: один понизився, а другий піднявся. Це можна пояснити розщепленням рівнів між двома квантовими ямами однакового розміру. Різниця енергій між енергетичними рівнями електрона становлять $\Delta E_{0,1} = 118.6 \text{ meV}$ і $\Delta E_{1,2} = 8 \text{ meV}$. При збільшенні крайніх нанокристалів спостерігається значна різницями між рівнями, коли система проходить симетричний випадок. Коли ж крайні КТ більші внутрішньої, наприклад $R_1 = R_3 = 4a_{GaAs}$, різниця енергій основного і першого збудженого станів стає невеликою – $\Delta E_{0,1} = 2 \text{ meV}$, на відміну від різниці енергій першого та другого збуджених станів $\Delta E_{1,2} = 52.6 \text{ meV}$. А при подальшому збільшенні розмірів $\Delta E_{0,1}$ стає меншим одного meV .

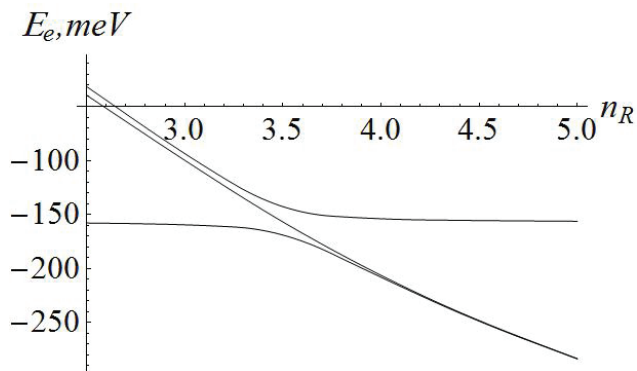


Рис. 6. Енергетичний спектр електрона в несиметричній лінійній КМ в залежності від розміру двох крайніх КТ.

Для енергетичного спектра електрона із Рис. 7. фіксованими були розміри крайніх КТ – $3.5a_{GaAs}$, а відстані між межами КТ була такою ж як і в попередньому випадку. У цій ситуації для розміру середньої КТ ($R_2 = 2.5a_{GaAs}$) в наносистемі буде існувати також три стаціонарні стани, проте основний та перший збуджений будуть близькі між собою – $\Delta E_{0,1} = 2.2 \text{ meV}$. А різниця $\Delta E_{1,2}$ становить 125.4 meV . Як і в по-

передньому випадку перебудова спектру відбувається після симетричного розміщення нанокристалів. Так уже коли $R_2 = 4a_{GaAs}$ основний стан знаходиться значно нижче, ніж два збудженні, а різниця рівнів приймає такі значення: $\Delta E_{0,1} = 2.2 \text{ meV}$, $\Delta E_{1,2} = 51.4 \text{ meV}$. На Рис. 6 та 7 спостерігається ефект, коли енергетичні рівні наближаються, але не перетинаються. Це явище відоме як антикросинг (anticrossing).

Крім методу лінійної комбінації орбіталей квантових як, в роботі було проведено розрахунки енергетичного спектра досліджуваної наносистеми методом скінчених елементів. Якісна картина наведених залежностей зберігається, проте кількісно рівні енергії відрізняються на 3 % для відстані дві сталі ґратки між межами нанокристалів, і зменшується до 0.7 %, коли відстань рівна 6 сталих ґратки.

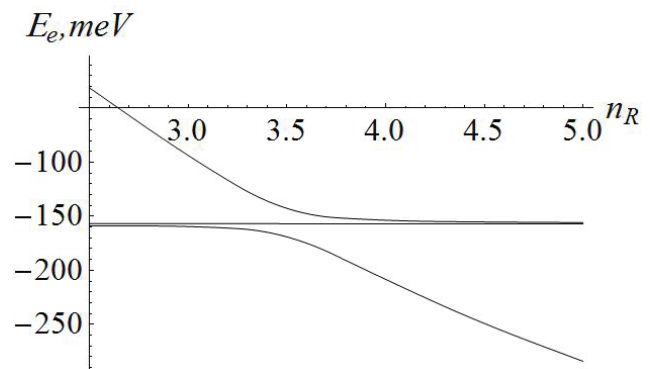


Рис. 7. Енергетичний спектр електрона в несиметричній лінійній КМ в залежності від розміру середньої КТ.

Цим методом було побудовано графіки ймовірності перебування електрона в досліджуваній КМ. При симетричному розміщенні нанокристалів в гетеросистемі (Рис. 8.) найбільша густина ймовірності перебування частинки в основному стані спостерігається в області середньої КТ (Рис. 8.а). Коли частинка перебуває в першому збудженому стані, графіки показують, що в області середньої КТ густина ймовірності близька до нуля, а максимальні значення будуть в двох крайніх (Рис. 8.б). Для другого збудженого стану (Рис. 8.в) знову максимум спостерігається в області середньої КТ, проте в цьому стані електрон має більшу густину ймовірності перебування в двох крайніх КТ, ніж в основному стані.

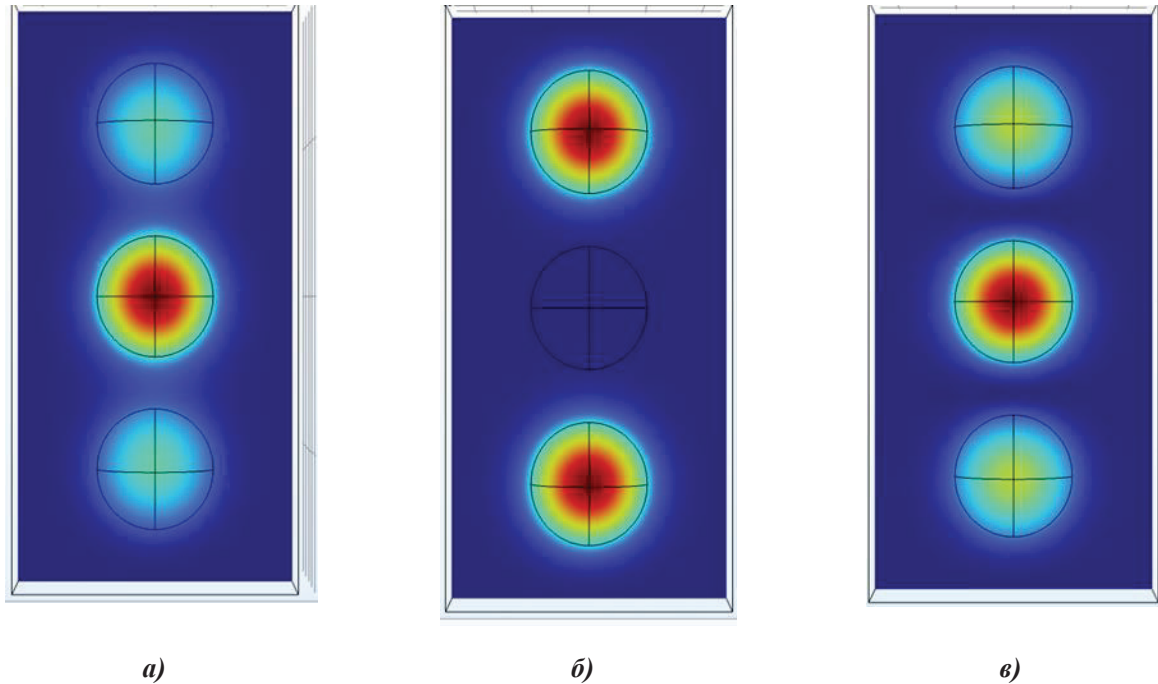


Рис. 8. Графік густини ймовірності перебування електрона на трьох найнижчих стаціонарних станах в лінійній квантовій молекулі, що утворена з нанокристалів сферичної форми (симетричний випадок). а) основний стан; б) перший збуджений стан; в) другий збуджений стан.

Якщо розглянути несиметричний випадок (Рис. 9.), коли крайня КТ віддаляється від двох інших, то в основному стані електрон найбільшу густину ймовірності має в середній

КТ, але в другій КТ, що близька до середньої, її значення близькі (Рис. 9.а). А в дальній КТ наближається до нуля. При переході електрона в перший збуджений стан (Рис. 9.б) відбувається

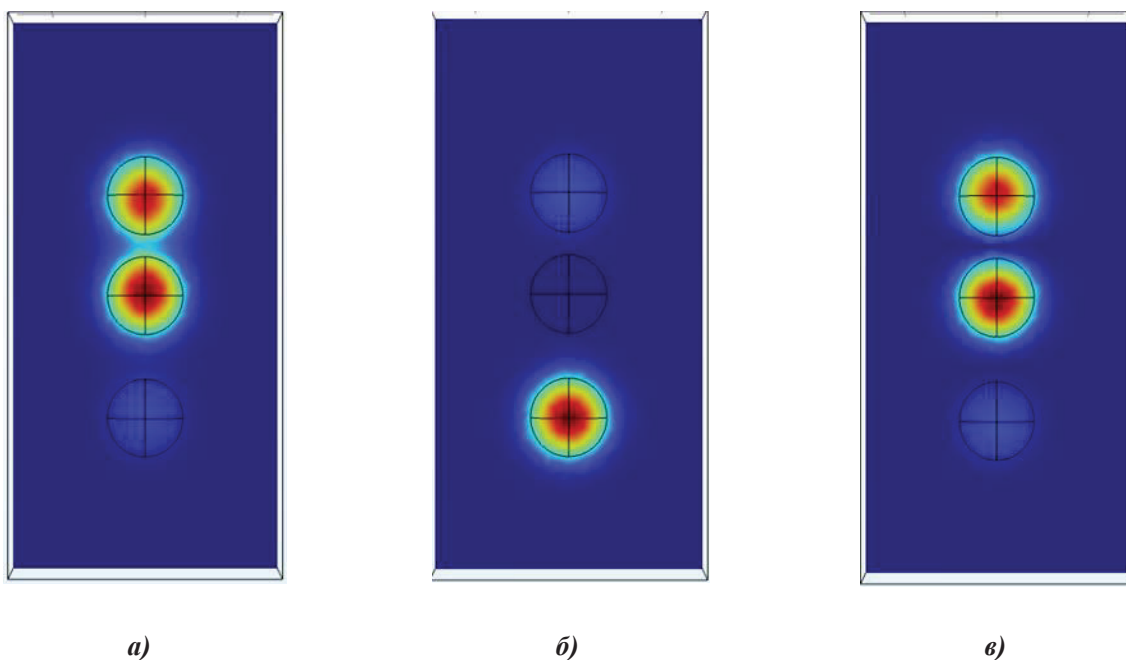


Рис. 9. Графік густини ймовірності перебування електрона на трьох найнижчих стаціонарних станах в лінійній квантовій молекулі, що утворена з нанокристалів сферичної форми (несиметричний випадок). а) основний стан; б) перший збуджений стан; в) другий збуджений стан.

різкий перерозподіл густини ймовірності, вона максимальні значенням набуває в дальній КТ, а двох близьких – мінімальні. Подібна ситуація спостерігається для двох найнижчих станів молекули BeH_2 : $1\sigma_g$ та $1\sigma_u$ [15]. У другому ж збудженому картина аналогічна до основного електронного стану, який теж має відповідність у молекулі $\text{BeH}_2 - 2\sigma_g$ (Рис. 9.в). Аналогічні результати дає обчислення ймовірності перебування електрона як для симетричного, так і несиметричного випадку. Цей ефект говорить про можливість керування електроном в досліджуваній наносистемі змінюючи енергію частинки.

Висновки

Отже, в роботі проаналізовано геометрію лінійної квантової молекули, яка утворена з трьох сферичних нанокристалів. Вибрано для дослідження чотири випадки розміщення. Отримано дисперсійне рівняння для дослідження енергетичного спектру електрона в лінійній КМ з трьох сферичних КТ. Проаналізовано вплив відстані між КТ та величини КТ на енергетичний спектр в симетричній КТ. В цьому випадку система характеризується трьома енергетичними рівнями, які із збільшення відстані зливаються в один. Також слід відмітити, що збільшення об'єму призводить до зменшення розщеплення енергетичних рівнів електрона. Цікава ситуація спостерігається в несиметричній лінійній КМ. При змінній відстані однієї КТ до двох інших гетеросистема характеризується трьома станами. А при зміні розмірів КТ наносистеми найбільш відчутна взаємодію спостерігається тоді, коли КТ мають близькі радіуси. Використання методу скінчених елементів підтвердило якісну картину результатів та дало можливість проаналізувати густину ймовірності та ймовірність перебування електрона в лінійній КМ. Результати показують, що можна керувати місцем перебування електрона, надавши йому певні значення енергії.

Список використаної літератури

- [1]. J. R. Petta, A. C. Johnson, J. M. Taylor, E. A. Laird, A. Yacoby, M. D. Lukin, C. M. Marcus, M. P. Hanson, and A. C. Gossard. Coherent Manipulation of Coupled Electron Spins in Semiconductor Quantum Dots // *Science* 309, 2180 (2005).
- [2]. L. Gaudreau, Granger G., Kam A., Aers G. C., Studenikin S. A., Zawadzki P., Pioro-Ladrière M., Wasilewski Z. R., Sachrajda A. S. Coherent control of three-spin states in a triple quantum dot // *Nature Physics* 8, 54–58 (2012).
- [3]. R. H. Blick, R. J. Haug, J. Weis, D. Pfannkuche, K. V. Klitzing, and K. Eberl. Single-Electron-Tunneling through a Double Quantum Dot // *Phys. Rev. B* 53, 7899 (1996).
- [4]. T. Takakura, Noiri A., Obata T., Otsuka T., Yoneda J., Yoshida K., and Tarucha S. Single to quadruple quantum dots with tunable tunnel couplings // *Appl. Phys. Lett.* 104, 113109 (2014).
- [5]. T. Ito, T. Otsuka, S. Amaha, M. R. Delbecq, T. Nakajima, J. Yoneda, K. Takeda, G. Allison, A. Noiri, K. Kawasaki, and S. Tarucha. Detection and control of charge states in a quintuple quantum dot // *Scientific Reports* 6, 39113 (2016).
- [6]. T. Hensgens, T. Fujita, L. Janssen, X. Li, C. J. Van Diepen, C. Reichl, W. Wegscheider, S. Das Sarma, and Vandersypen L. M. K. Quantum simulation of a Fermi-Hubbard model using a semiconductor quantum dot array // *Nature* 548, 70 (2017).
- [7]. F. Martins, F. K. Malinowski, P. D. Nissen, S. Fallahi, G. C. Gardner, M. J. Manfra, C. M. Marcus, and Kuemmeth F. Negative Spin Exchange in a Multielectron Quantum Dot // *Phys. Rev. Lett.* 119, 227701 (2017).
- [8]. Leshko R., Bandura H., Bilynskyi I., Slusarenko M. The band structure of a chain of periodically ordered different quantum dots // *Physica B: Condensed Matter*. 690, 416272 (2024).
- [9]. V. I. Boichuk, I. V. Bilynskyi, R. I. Paziuk. Koefitsiient pohlynannia svitla, shcho zumovlenyi mizhpidzonnyy perekhodamy elektroniv u

nadhratkakh sferychnykh kvantovykh tochok // Zhurnal fizychnykh doslidzhen 19, No. 1/2, 1601 (2015) (*in Ukrainian*).

[10]. V. I. Boichuk, V. B. Holskyi. Doslidzhennia vplyvu vzaiemodii dvokh sferychnykh nanokrystaliv systemy β -HgS / CdS na enerhetychnyi spektr elektronu // UFZh 46, No. 3, 342–345 (2001) (*in Ukrainian*).

[11]. V. I. Boichuk, I. V. Bilynskyi, V. B. Holskyi. Elektron u dvokh zviazanykh nanoheterokrystalakh kubichnoi formy // UFZh 48, No. 1, 56–60 (2003) (*in Ukrainian*).

[12]. V. I. Boichuk, V. B. Holskyi. Eksyton Vanie-Motta u dvokh tunelno-zviazanykh kvantovykh tochkakh tsylindrychnoi formy

// Naukovi zapysky NaUKMA 23, 50–53 (2004) (*in Ukrainian*).

[13]. I. V. Bilynskyi, V. B. Hols'kyi, R. Ya. Leshko. Optical properties and single-electron states of the nanosystem that contains three quantum dots // Condensed Matter Physics 23, No 1, 13401 (2020).

[14]. V. B. Hols'kyi, R. Y. Leshko. The influence of deformations on single electron states in a molecule formed from three quantum dots of the heterosystem InAs/GaAs// Physics and Chemistry of Solid State 23 (4), 686–692 (2022).

[15]. V. K. Yatsymyrskyi. Kvantova khimiia: pidruchnyk. – K.: Vydavnycho-polihrafichnyi tsentr «Kyivskyi universytet», 2009.– 479 p. (*in Ukrainian*).

Стаття надійшла до редакції 18.05.2025 р.

PACS: 79.60.Gv

DOI: <https://doi.org/10.18524/1815-7459.2025.2.330121>

RESEARCH ON THE INFLUENCE OF THE GEOMETRY OF A QUANTUM MOLECULE ON ELECTRONIC STATIONARY STATES

V. B. Holskyi, R. Ya. Leshko, V. R. Karpiy, K. V. Holskyi

Drohobych Ivan Franko State Pedagogical University,
Department of Physics and Information Systems,
3 Stryyska St, Drohobych, Ukraine, e-mail: hol.wit@dspu.edu.ua

Abstract. The work is devoted to the study of a quantum molecule formed from three spherical quantum dots placed along one straight line. The geometry of a linear quantum molecule formed from three spherical nanocrystals is analyzed. Four placement cases are selected for the study. A dispersion equation is obtained for the study of the energy spectrum of an electron in a linear QM from three spherical QDs. The influence of the distance between the QDs and the QD size on the energy spectrum in a symmetric QD was analyzed. The finite element method was used for comparison, which confirmed the qualitative picture of the results and made it possible to analyze the probability density and the probability of an electron being in a linear QD. The results show that it is possible to control the location of an electron by giving it certain energy values.

Keywords: quantum molecule, electron energy spectrum, particle probability