

УДК 538.958, 538.915

Міжрівневе домішкове поглинання світла сферичною квантовою точкою*Бойчук В. І., Лешко Р. Я., Турянська Л. М.*

leshkoroman@mail.ru

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, кафедра теоретичної фізики,
вул. Стрийська 3, м. Дрогобич, 82100

Визначено коефіцієнт поглинання світла, що пов'язаний з міжпідрівневими домішковими переходами, що індуковані поляризованим світлом обчислено з використанням компактного підходу матриці густини. У роботі проведено порівняння одержаних результатів при врахуванні та нехтуванні поляризаційних зарядів. Показано, що коефіцієнт поглинання залежить від просторового обмеження і розташування домішки у квантовій точці. Визначено вплив поляризаційних зарядів на коефіцієнт поглинання.

1. Вступ

Сучасний розвиток нановиробництва зробив можливим виготовляти наносистеми, які мають кращі властивості, ніж масивні кристали. Актуальним завданням сучасних нанотехнологій є пошук нових матеріалів, які можуть бути використані в нанoeлектроніці. Найбільш продуктивним шляхом у цьому напрямку є використання різних нанооб'єктів - таких як квантові точки (КТ), квантові дроти, квантові ями та їх поєднання. КТ заслужують на особливу увагу, бо вони мають такі властивості, як штучні атоми. Центральною характеристикою цих об'єктів є одночастинкові стани, які і визначають різні властивості КТ.

Фізичні характеристики сферичних КТ (такі, як дипольний момент, сила осцилятора, коефіцієнт поглинання світла) можуть значно залежати від наявності домішок у них.

Одними з перших робіт, де досліджувалися властивості центральної водневоподібної домішки є роботи [1, 2]. Для водневоподібної домішки у сферичній КТ знайдено точні розв'язки рівняння Шредінгера з кулонівською взаємодією між частинками. Потенціал обмеження було вибрано у вигляді сферично-симетричної прямокутної потенціальної ями, що зумовлена розривом зон на гетеромежах. Дослідження нецентральної домішки [3] стало наступним кроком у вивченні домішок. З цією метою використано лінійний варіаційний метод. Результати показали розщеплення і зміну порядку енергетичних рівнів у залежності від розмірів КТ, розташування домішки та глибини квантової ями. Причиною розщеплення енергетичних рівнів є порушення сферичної симетрії системи. На основі точних розв'язків для центральної домішки проведено також обчислення тонкої енергетичної структури домішки [4]. У вищезгаданих та інших роботах [1, 2, 3, 4, 5, 6] розрахунки проводилися для гетеросистем, параметри яких не значно відрізнялися. Тому єдиним параметром, що задавав гетероструктуру, був потенціал обмеження. У роботі [7] розвинуто теорію спектра і хвильових функцій домішкового електрона наногетеросистеми зі сферичною квантовою точкою при врахуванні різної ефективної маси та величини діелектри-

чної проникливості у різних середовищах. Однак потенціальна енергія взаємодії іона домішки з електроном містила розрив на гетеромежах.

На даний час використовуються різні ускладнені моделі та обчислюються на їх основі оптичні параметри КТ. Енергетичні спектри домішкового електрона визначено у кубічній КТ варіаційним методом [8]. Загальні властивості домішок у сферичній КТ за наявності зовнішнього електричного поля проаналізовано у [9], використовуючи розклад по плоских хвилях. Досліджено ефект Штарка. У [10] проведено порівняння варіаційних методів та теорії збурення при визначенні енергії домішки. Показано, що у загальному випадку варіаційні методи дають кращі результати. Еліпсоїдальну КТ з нецентральною водневоподібною домішкою та параболічним потенціалом розглянуто у [11]. Власні стани домішки визначено методом розкладу хвильової функції по точних функціях задачі з центральною домішкою. Результати для енергії зв'язку домішки подано як функції розташування домішки та параметра еліптичності.

Оскільки матричні елементи дипольного моменту міжпідрівневих переходів у КТ досить великі [12], а енергій переходів малі, то ймовірність поглинання фотонів з відповідною енергією може значно змінюватися. Через те і коефіцієнт поглинання світла [13, 14], що зумовлений внутрізонними міжпідрівневими переходами КТ значно відрізняється від коефіцієнта внутрізонного поглинання масивного кристала. Інтерес до внутрізонних міжпідрівневих переходів зумовлений тим, що енергія переходу знаходяться у терагерцовому діапазоні. А джерела випромінювання такого діапазону часто використовуються у медичних, біофізичних, астрофізичних дослідженнях. Результати досліджень міжпідрівневих переходів можуть бути використані для побудови детекторів зазначеного випромінювання.

Останнім часом увага звернена до дослідження лінійного та нелінійного коефіцієнту поглинання світла, що зумовлений міжпідрівневими переходами [12]. Появилась значна кількість теоретичних робіт, в яких досліджено оптичні властивості КТ з домішками [13, 14, 15, 16]. Аналізувалися

як сферичні [15, 16, 17], так і еліпсоїдальні [18] КТ, домішка розглядалася як центрі, так і не у центрі КТ. Потенціал обмеження задавався і параболічним [17], і за допомогою потенціалу Гауса [16]. Використовувався також і скінченний прямокутний потенціал [18]. Але у всіх цих роботах потенціальна енергія взаємодії частинок записувалася у вигляді кулонівської взаємодії у діелектрично однорідному середовищі, що не зовсім відповідає реальній фізичній картині.

У загальному випадку діелектрична проникність для наногетероструктур є різною, тобто залежить від координат. Тому, враховуючи це, у роботі [19] варіаційним методом визначено енергію основного стану домішки у сферичній КТ з врахуванням просторового діелектричного екранування.

Для послідовного врахування різниці між діелектричними проникностями нанооб'єкта і матриці необхідно розв'язати рівняння Пуассона. У роботах [20, 21, 22, 23, 24] для заряджених частинок розв'язано рівняння Пуассона. На основі цих розв'язків визначено енергію взаємодії електрона і дірки з поляризаційними зарядами, що виникають на гетеромежах при врахуванні існування перехідного шару, в якому діелектрична проникність залежить від координати. Розглянуто випадок, коли такого перехідного шару не існує. Визначено вплив поляризаційних зарядів на межах поділу середовищ на екситонні та поверхневі стани гетеросистеми. Отримані в цих роботах формули можна використати для запису потенціальної енергії взаємодії електрона з іоном домішки і для обчислення поправок до домішкових рівнів, що і зроблено у [25].

Отже, зважаючи на вище зазначене, метою цієї роботи є:

1. Визначення енергії водневоподібної домішки, що розташована у центрі і не у центрі КТ з врахуванням поляризаційних зарядів на гетеромежах, які зіндуковані домішковим електроном та іоном домішки;
2. Визначення впливу розташування домішки та поляризаційних зарядів на оптичні властивості сферичної КТ;
3. Порівняння результатів з відповідними результатами без врахування поляризаційних зарядів.

2. Теорія

Розглядається сферична наногетеросистема. Вона складається з нанокристала радіуса a , діелектрична проникність якого ε_1 , який поміщений у матрицю з діелектричною проникністю ε_2 . Ефективна маса електрона в КТ m_1^* , а в матриці m_2^* . У цій сферичній КТ знаходиться донорна домішка на відстані D від центра. Систему координат вибрано так, що вісь z проходить через центр КТ

та домішку. Гамільтоніан такої системи записано у вигляді:

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

де потенціальна енергія $\Pi(\mathbf{r})$ є сумою:

$$\Pi(\mathbf{r}) = U(r) + W(\mathbf{r}) + V_p(r). \quad (2)$$

Тут потенціальна енергія, що зумовлена розривом зон гетероструктури, така:

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a, \\ U_0, & r > a. \end{cases} \quad (3)$$

Потенціальна енергія взаємодії електрона з іоном домішки, що одержана на основі розв'язку рівняння Пуассона і яка враховує взаємодію електрона з поляризаційними зарядами, зумовленими йоном домішки $W(\mathbf{D}, \mathbf{r})$, виражається складною формулою [21, 23]. У випадку, коли іон домішки знаходиться у центрі ($D = 0$), цей вираз спрощується і зводиться до вигляду:

$$W(\mathbf{r}, 0) = V(r) = -e^2 \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon_1 r} + \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 a}, & r \leq a, \\ \frac{1}{\varepsilon_2 r}, & r > a. \end{cases} \quad (4)$$

Потенціальна енергія взаємодії електрона з поляризаційними зарядами $V_p(r)$, які цей електрон сам індукує (потенціал самодії), відома [22, 24].

Рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (1) розв'язано для двох випадків: а) домішка у центрі; б) домішка не у центрі.

2.1. Центральна водневоподібна домішка

Рівняння Шредінгера для центральної домішки з потенціальною енергією (2) розв'язати точно не можна, бо у потенціал самодії входять гіпергеометричні функції [22, 24]. У роботі [22] показано, що потенціал самодії є малою величиною порівняно з потенціалом обмеження. Тому, якщо знехтувати потенціалом самодії $V_p(r)$ у нульовому наближенні, можна одержати точні розв'язки рівняння Шредінгера. Враховуючи сферичну симетрію задачі, хвильову функцію домішкового електрона подано у вигляді добутку радіальної і кутової складових $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Відповідні радіальні рівняння можна записати у середині та зовні КТ. У цьому випадку можна скористатися розв'язками [5, 7] для дискретного спектру, модифікувавши їх з метою врахування другого доданку (4). В області $r \leq a$ розв'язки відповідного радіального рівняння можна подати за допомогою функції Віттекера:

$$g_1(\xi_1) = A_1 M_{\lambda_1, l+1/2}(\xi_1), \quad (5)$$

якщо

$$\begin{aligned}\xi_1 &= \alpha_1 r, \quad (\alpha_1)^2 = -8m_1^* \tilde{E}_1 / \hbar^2, \\ \tilde{E}_1 &= E + \frac{e^2 (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 a} < 0, \\ \lambda_1 &= 2m_1^* e^2 / (\varepsilon_1 \hbar^2 \alpha_1), \quad R_1(\xi_1) = g_1(\xi_1) / \xi_1,\end{aligned}$$

або за допомогою регулярної функції Кулона:

$$g_1(\xi_1) = A_1 F_1(\delta_1, \xi_1), \quad (6)$$

якщо

$$\begin{aligned}\xi_1 &= \beta_1 r, \quad \beta_1^2 = 2m_1^* \tilde{E}_1 / \hbar^2, \\ \tilde{E}_1 &= E + \frac{e^2 (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 a} > 0, \\ \delta_1 &= -m_1^* e^2 / (\varepsilon_1 \hbar^2 \beta_1), \quad R_1(\xi_1) = g_1(\xi_1) / \xi_1.\end{aligned}$$

У зовнішній області ($r > a$) скінченням розв'язком при $r \rightarrow \infty$ буде інша функція Віттекера:

$$g_2(\xi_2) = D_2 W_{\lambda_2, l+1/2}(\xi_2). \quad (7)$$

де

$$\begin{aligned}\xi_2 &= \alpha_2 r, \quad (\alpha_2)^2 = -8m_2^* \tilde{E}_2 / \hbar^2, \quad \tilde{E}_2 = E - U_0 < 0, \\ \lambda_2 &= 2m_2^* e^2 / (\varepsilon_2 \hbar^2 \alpha_2), \quad R_2(\xi_2) = g_2(\xi_2) / \xi_2.\end{aligned}$$

Застосовуючи граничні умови та умову нормування, –

$$\begin{aligned}R_1(r)|_{r=a} - R_2(r)|_{r=a} &= 0, \\ \frac{1}{m_1^*} \frac{\partial}{\partial r} R_1(r) \Big|_{r=a} - \frac{1}{m_2^*} \frac{\partial}{\partial r} R_2(r) \Big|_{r=a} &= 0, \quad (8) \\ \int d\mathbf{r} |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 &= 1,\end{aligned}$$

знайдено енергетичний спектр домішки та невідомі коефіцієнти у хвильових функціях. Вплив ($V_p(r)$) враховано у першому та другому порядку теорії збурень.

2.2. Нецентральна водневоподібна домішка

Рівняння Шредінгера для нецентральної домішки розв'язано лінійним варіаційним методом, як у [3], та методом Рітца.

У першому підході гамільтоніан нецентральної домішки можна подати у вигляді:

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)}, \quad (9)$$

де

$$\hat{H}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m^*} \nabla + U(r) + V(r) \quad (10)$$

– гамільтоніан водневоподібної домішки, що розташована у центрі КТ, з яким рівняння Шредінгера розв'язується точно, а

$$\hat{H}^{(1)} = -V(r) + W(\mathbf{D}, \mathbf{r}) + V_p(r). \quad (11)$$

Хвильову функцію нецентральної домішки подано у вигляді розкладу по функціях домішки у центрі КТ:

$$\psi = \sum_i c_i \psi_i^{(c)}, \quad (12)$$

де $\psi_i^{(c)}$ – хвильові функції центральної домішки, i – сукупність квантових чисел. Підставляючи (12) у рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (9) та домножуючи одержане рівняння на спряжену функцію $(\psi_i^{(c)})^*$, отримано лінійну систему рівнянь відносно коефіцієнтів c_i :

$$\sum_i \left((E_i^{(0)} - E) \delta_{ij} + H_{ji}^{(1)} \right) c_i = 0. \quad (13)$$

З системи 13 знайдено енергетичний спектр нецентральної домішки.

У центральному кулонівському полі КТ існує нескінченне число зв'язаних станів, тобто маємо нескінченну суму в (12)-(13). Практично для досягнення потрібної збіжності треба брати скінченне велике число доданків. А зважаючи на складний вигляд потенціалу самодії, обчислення матричних елементів ускладнюється. Саме тому у цій роботі запропоновано ще і варіаційний метод Рітца для обчислення основного та першого збудженого станів.

Для побудови пробної функції використано задачу про одну частинку (електрон) у скінченній сферичній потенціальній ямі. Радіальну складову хвильової функції основного стану (1s-стану) заряду у сферичній потенціальній ямі (без іона домішки) з скінченим потенціалом на межі поділу середовищ можна виразити за допомогою сферичної функції Бесселя першого роду та модифікованої сферичної функції Бесселя другого роду:

$$\begin{aligned}\psi_{1s}^0(r) &= \begin{cases} A_{1s,1} \cdot j_0(k_{1s}r), & r \leq a, \\ A_{1s,2} \cdot k_0(\chi_{1s}r), & r > a, \end{cases} = \\ &= \begin{cases} g_{1s,1}(r), & r < a, \\ g_{1s,2}(r), & r \geq a, \end{cases} \quad (14)\end{aligned}$$

де

$$k_{1s} = \sqrt{\frac{2m_1^*}{\hbar^2} E_{10}}, \quad \chi_{1s} = \sqrt{\frac{2m_2^*}{\hbar^2} (U_0 - E_{10})},$$

E_{10} – енергія основного стану частинки без домішки, а сталі $A_{1s,1}$ та $A_{1s,2}$ визначаються з граничних умов та умови нормування типу (8).

Отже, пробна функція основного стану (s-типу) запишеться у наступному вигляді:

$$\Psi_1(\mathbf{r}) = \begin{cases} B_{1,1} \cdot g_{1,1}(r) \exp[-\alpha_1 \lambda(r, D, \theta)], & r \leq a, \\ B_{1,2} \cdot g_{1,2}(r) \exp[-\beta_1 \lambda(r, D, \theta)], & r > a, \end{cases} \quad (15)$$

де $\lambda(r, D, \theta) = \sqrt{r^2 + D^2 - 2rD \cos \theta}$. З граничних умов для функції (15) знаходимо

$$B_{1,2} = B_{1,1} \exp \left[(\beta_1 - \alpha_1) \sqrt{r^2 + D^2 - 2rD \cos \theta} \right],$$

$$\beta_1 = \frac{m_2^*}{m_1^*} \alpha_1.$$

Енергію основного стану та варіаційні параметри знайдено мінімізацією функціоналу:

$$E_1(\alpha) = \frac{\langle \Psi_1 | \mathbf{H} | \Psi_1 \rangle}{\langle \Psi_1 | \Psi_1 \rangle}. \quad (16)$$

Експонента у (15) описує взаємодію електрона з позитивно зарядженим ядром домішки, α_1 – варіаційний параметр, $B_{1,1}$ – стала нормування.

У цій роботі також варіаційним методом обчислено ще і перший збуджений стан. Згідно з обчисленнями, що проведені лінійним варіаційним методом, першим збудженим станом сферичної КТ з центральною домішкою є 2р-стан. Радіальну складову хвильової функції для збудженого 2р-стану заряду (без іона домішки) у сферичній потенціалній ямі можна записати так:

$$\psi_{2p}^0(r) = \begin{cases} A_{2p,1} \cdot j_1(k_{2p}r), & r < a, \\ A_{2p,2} \cdot k_1(\chi_{2p}r), & r \geq a, \end{cases} =$$

$$= \begin{cases} g_{2p,1}(r), & r \leq a, \\ g_{2p,2}(r), & r > a, \end{cases} \quad (17)$$

де $k_{2p} = \sqrt{\frac{2m_1^*}{\hbar^2} E_{21}}$, $\chi_{2p} = \sqrt{\frac{2m_2^*}{\hbar^2} (U_0 - E_{21})}$, E_{21} – енергія 2р-стану частинки, а сталі $A_{2p,1}$ та $A_{2p,2}$ визначаються з граничних умов та умови нормування.

Коли домішка знаходиться не у центрі, 2р-стан розщеплюється на два стани з магнітним квантовим числом $|m| = 0; 1$ [3]. Нижчим енергетичним рівнем є стан з $m = 0$. Саме тому варіаційну хвильову функцію вибрано так:

$$\Psi_2(\mathbf{r}) = (\cos \theta - D/c) \times$$

$$\times \begin{cases} B_{2,1} \cdot g_{2p,1}(r) \exp[-\alpha_2 \lambda(r, D, \theta)], & r \leq a, \\ B_{2,2} \cdot g_{2p,2}(r) \exp[-\beta_2 \lambda(r, D, \theta)], & r > a. \end{cases} =$$

$$= (\cos \theta - D/c) F_2(\mathbf{r}), \quad (18)$$

де $\lambda(r, D, \theta) = \sqrt{r^2 + D^2 - 2rD \cos \theta}$, c – деяка стала, що визначатиметься з умови ортогональності функцій (15) та (18). З граничних умов для функції (18) знаходимо:

$$B_{2,2} = B_{2,1} \exp \left[(\beta_2 - \alpha_2) \sqrt{r^2 + D^2 - 2rD \cos \theta} \right], \quad (19)$$

$$\beta_2 = \frac{m_1^* + m_2^* (\alpha_2 (\sqrt{a^2 + D^2 - 2aD \cos \theta} - 2) - 1)}{m_1^* (\sqrt{a^2 + D^2 - 2aD \cos \theta} - 2)}. \quad (20)$$

Послідовно вирази (19) і (20) підставимо у (18). З умови ортогональності

$$\int d\mathbf{r} \Psi_1(\mathbf{r}) \Psi_2(\mathbf{r}) = 0$$

знаходимо

$$c = D \frac{\int d\mathbf{r} \Psi_1(\mathbf{r}) F_2(\mathbf{r})}{\int d\mathbf{r} \Psi_1(\mathbf{r}) \cos \theta F_2(\mathbf{r})}. \quad (21)$$

Коефіцієнт c згідно (21) залежить лише від варіаційного параметра α_2 , бо $F_2(\mathbf{r})$ залежить від цього ж параметра, а $\Psi_1(\mathbf{r})$ вже повністю визначена для основного стану. Далі (21) підставляємо в (18). Таким чином, варіаційна хвильова функція залежатиме лише від одного варіаційного параметра α_2 . Тому мінімізацією функціонала типу (16) можна знайти енергію нецентральної домішки для першого збудженого стану.

2.3. Оптичні властивості

Оптичні властивості КТ з водневоподібною домішкою обчислено з використанням енергетичного спектру та хвильових функцій, які знайдено варіаційним методом Рітца як з врахуванням поляризаційних зарядів, так при їх нехтуванні.

Розглядається випадок коли КТ опромінюється лінійно поляризованим світлом вздовж осі z (напрямку зміщення домішки від центра КТ). Для дворівневої системи дипольний момент переходу можна подати у вигляді:

$$M_{1,2} = \langle 2 | ez | 1 \rangle = \int d\mathbf{r} \Psi_2^*(\mathbf{r}) e r \cos \theta \Psi_1(\mathbf{r}), \quad (22)$$

а силу осцилятора записати так:

$$f_{1,2} = \frac{2m_0}{e^2 \hbar^2} (E_2 - E_1) |M_{1,2}|^2. \quad (23)$$

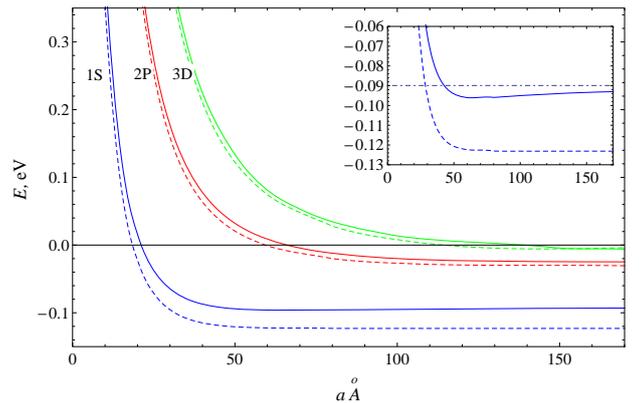


Рис.1. Енергія основного (1S) та збуджених (2P, 3D) станів центральної домішки у сферичній КТ. Штрихові лінії позначають енергію без врахування поляризаційних зарядів (коли використовується середнє значення діелектричних проникностей $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_{aver}$), суцільні – з врахуванням.

Коефіцієнт поглинання світла, що зумовлений міжрівневим переходом з основного стану у перший збуджений стан визначено на основі відомої формули [14]:

$$\alpha(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0 \varepsilon}} \frac{\sigma |M_{1,2}|^2 \hbar \Gamma_{1,2}}{(E_2 - E_1 - \hbar \omega)^2 + (\hbar \Gamma_{1,2})^2}, \quad (24)$$

де ω – частота падаючої хвилі, ε_0 – електрична стала, μ_0 – магнітна стала, ε – діелектрична проникність КТ, $\hbar \Gamma_{1,2}$ – енергія релаксації, що зумовлена електрон-фононою взаємодією та іншими факторами розсіяння. Густина зарядів у КТ σ вибрано на основі припущення, що у КТ може знаходитись лише 1 електрон (домішковий електрон), тому $\sigma = 3 / (4\pi a^3)$.

3. Аналіз результатів

Конкретні обчислення проведено для КТ гетеросистеми CdS/SiO_2 , параметри якої наступні:

$$m_1^* = 0.2, \quad m_2^* = 0.42, \quad \varepsilon_1 = 5.5, \\ \varepsilon_2 = 3.9, \quad U_0 = 2.7 \text{ eV}.$$

Якщо у всіх вищенаведених формулах прийняти, що діелектричні проникності однакові і дорівнюють їх середньому арифметичному значенню ($\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_{aver}$), то зникають усі поляризаційні доданки. Тобто

$$V_p(r) = 0, \quad W(\mathbf{r}, 0) = V(r) = \frac{-e^2}{\varepsilon_{aver} r},$$

$$W(\mathbf{D}, \mathbf{r}) = \\ = \frac{-e^2}{\varepsilon_{aver}} \begin{cases} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{r^n}{D^{n+1}} P_n(\cos(\theta)), & D > r, \\ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{D^n}{r^{n+1}} P_n(\cos(\theta)), & D < r, \end{cases} = \\ = \frac{-e^2}{\varepsilon_{aver} |\mathbf{r} - \mathbf{D}|}.$$

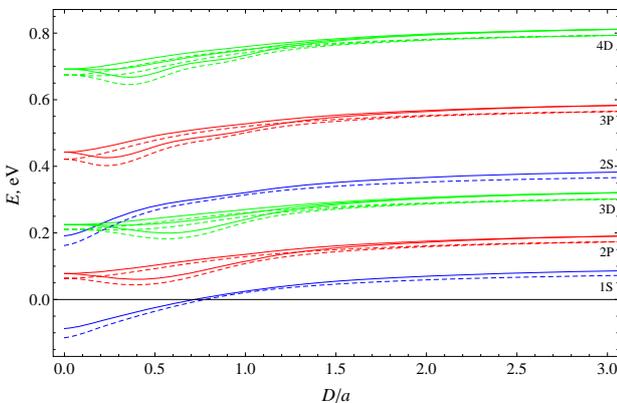


Рис.2. Енергія основного та збуджених станів нецентральної домішки у сферичній КТ, як функція розташування домішки. Штрихові лінії позначають енергію без врахування поляризаційних зарядів ($\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_{aver}$), суцільні – з врахуванням. Радіус КТ $a = 40 \text{ \AA}$.

У випадку центральної домішки знайдено точні розв'язки (5)-(7), а вплив поляризаційних зарядів визначено на основі теорії збурень. Результати обчислень подано на рис. 1. З рисунка видно, що врахування точних потенціалів в сумі приводить до збільшення енергії для будь-якого значення a . Потенціал самодії збільшує енергію домішки, а потенціал (4) – зменшує її. Для основного стану існує важлива особливість у залежності енергії від радіуса КТ – мінімум. Його наявність зумовлена конкуруванням двох факторів: просторового обмеження, яке збільшує енергію, та зростання глибини ефективної потенціальної ями, що залежить від доданку $V_0(a) = -e^2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) / (\varepsilon_1 \varepsilon_2 a)$ з (4), яке зменшує енергію. Аналогічні мінімуми існують і для збуджених станів, однак вони менш чіткі і зміщені у сторону зростання радіуса КТ. Наприклад, енергія 2P-стану має мінімум при $a \approx 170 \text{ \AA}$. Вводячи середнє значення діелектричної проникності, ми нехтуємо усіма поляризаційними поправками, тому мінімум у залежності не спостерігається (штрихові лінії).

Енергетичний спектр нецентральної домішки, що обчислено лінійним варіаційним методом подано на рис. 2. При обчисленні (13) у сумі враховано стани з однаковими орбітальними та магнітними числами, тобто розклад функції (12) проведено по радіальному квантовому числі при фіксованому орбітальному і магнітному. Наприклад, для обчислення стану 2P-типу вибрано $l = 1, m = 0$ (рис. 2, нижні криві 2P) та $l = 1, m = \pm 1$ (рис. 2, верхні криві 2P). В обчисленнях використано 15 перших доданків з суми. Як і для центральної домішки врахування взаємодії заряджених частинок з поляризаційними зарядами веде до загального збільшення енергії домішки порівняно з випадком їх неврахування.

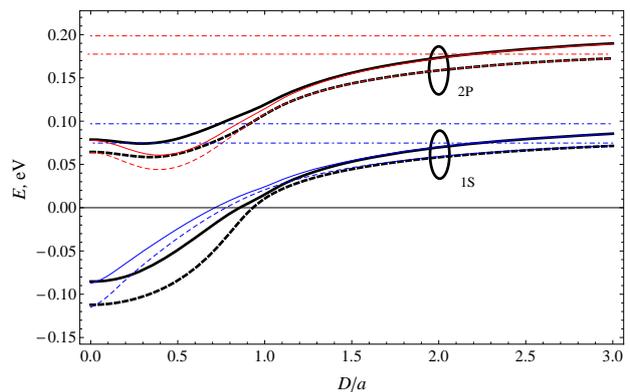


Рис.3. Енергія основного (1S-типу) та першого збудженого (2P-типу) станів нецентральної домішки у сферичній КТ, як функція розташування домішки. Штрихові лінії позначають енергію без врахування поляризаційних зарядів ($\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_{aver}$), суцільні – з врахуванням. Чорні криві – енергії, що обчислені варіаційним методом Рітца, сині та червоні – лінійним варіаційним методом. Горизонтальні штрих-пунктирні криві позначають енергію електрона у КТ без іона домішки (з врахуванням та без врахування поляризаційних зарядів). Радіус КТ $a = 40 \text{ \AA}$.

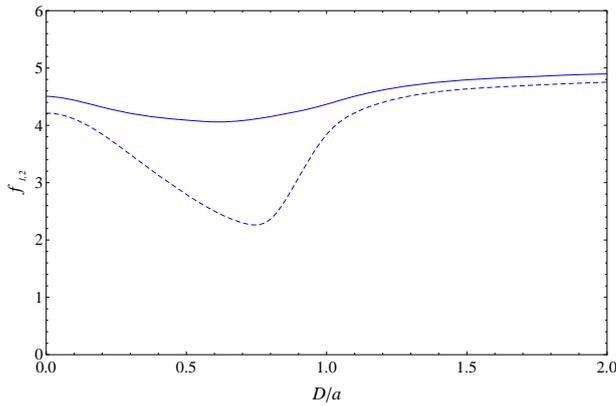


Рис.4. Залежність сили осцилятора від розташування домішки у КТ. Штрихові лінії позначають відповідну величину без врахування поляризаційних зарядів, суцільні – з врахуванням. Радіус КТ $a = 40 \text{ \AA}$.

В обох випадках одержана аналогічна структура енергетичних рівнів, що узгоджується з результатами роботи [3]. Зміщення іона домішки від центра КТ веде до розщеплення енергетичних рівнів. Якщо ж іон домішки знаходиться за межами КТ на значних відстанях, то енергія електрона прямує до відповідної енергії електрона у сферичній КТ без домішки.

Як уже зазначалось, обчислення основного та першого збудженого стану проведено ще і варіаційним методом Рітца. Результати обчислень енергії подано на рис. 3. Також на ньому зображено графіки енергії цих же станів, що обчислено лінійним варіаційним методом для їх порівняння. З рисунка чітко видно, що варіаційний метод Рітца дає кращі результати для енергії основного стану, але гірші для першого збудженого стану в порівнянні з лінійним варіаційним методом.

Ці розбіжності спостерігаються, коли іон домішки зміщується від центра і перебуває у КТ. Коли ж іон домішки знаходиться за межами КТ, то два методи дають практично однакові результати. Відповідна різниця зменшується при зростанні D/a .

Для обчислення оптичних властивостей використовуються варіаційні функції (15), (18). На рис.4 подано графіки залежності сили осцилято-

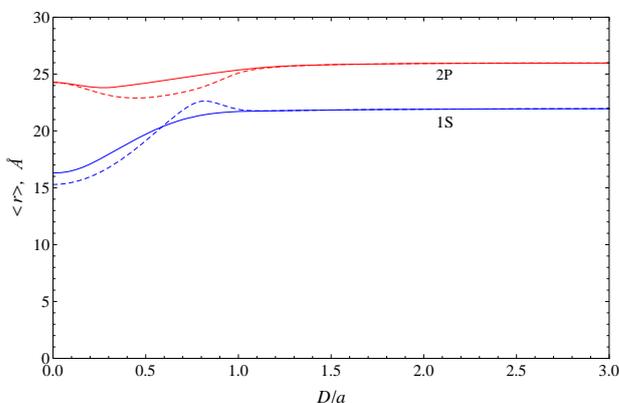


Рис.5. Залежність середніх відстаней електрона до центра КТ від розташування домішки у КТ. Штрихові лінії позначають відповідну величину без врахування поляризаційних зарядів, суцільні – з врахуванням. Радіус КТ $a = 40 \text{ \AA}$.

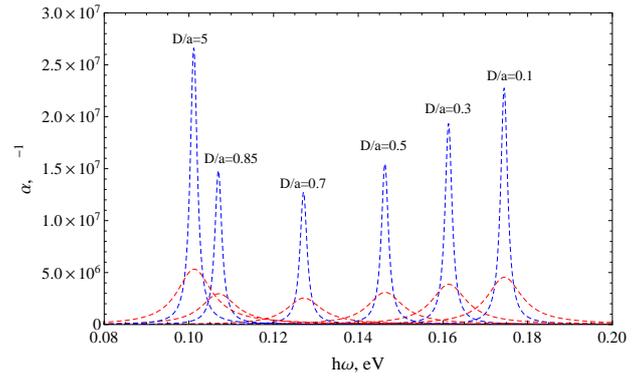


Рис.6. Залежність коефіцієнта поглинання від енергії падаючого кванта світла без врахування поляризаційних зарядів. Сині криві позначають коефіцієнт поглинання коли $\hbar\Gamma_{1,2} = 10^{-3} \text{ eV}$, червоні – $\hbar\Gamma_{1,2} = 5 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$. Радіус КТ $a = 40 \text{ \AA}$.

ра $f_{1,2}$ від розташування домішки у КТ. З графіків видно, що врахування поляризаційних зарядів веде до збільшення відповідних величин і до зменшення немонотонності у залежності. Наявність немонотонної залежності можна пояснити немонотонною залежністю дипольного моменту міжрівневих переходів $M_{1,2}$, що в свою чергу зумовлений зміною просторового розташування електрона при зміні D/a (рис.5).

З рис.5 видно, середня відстань електрона в основному стані є найближчою до середньої відстані електрона у збудженому стані при $D/a \approx 0.7$. Саме тому у цій же точці спостерігається мінімум у залежності $f_{1,2}$ від D/a . У цій точці різниця середніх відстаней в моделі, в якій не враховуються поляризаційні заряди, є меншою, ніж для випадку їх врахування. Останнє є причиною того, що врахування поляризаційних зарядів зменшує немонотонність у залежності $f_{1,2}$ від D/a . Збільшення D/a веде до того, що сила осцилятора $f_{1,2}$ прямує до відповідних величин, які можна одержати у задачі про електрон у сферичній КТ без іона домішки. Завдяки включенню до розгляду потенціалів взаємодії зі “своїми” та “чужими” поляризаційними зарядами одержано як якісну, так і кількісну зміну залежності $f_{1,2}$, що і відобразиться на коефіцієнті поглинання.

На рис.6 подано графіки залежності коефіцієнта поглинання лінійно поляризованого світла вздовж осі z , яким опромінують КТ від енергії фотона $\hbar\omega$ для різних значень $\hbar\Gamma_{1,2}$, коли не враховуються поляризаційні заряди. З рисунка видно, що збільшення $\hbar\Gamma_{1,2}$ веде до зменшення піку поглинання і до його розширення. Встановлено, що віддалення іона домішки від центра КТ викликає зміщення піку поглинання у низькоенергетичну область. Спостерігається зменшення висоти піку поглинання, якщо D/a збільшується до 0.7. Подальше збільшення D/a веде знову до зростання висоти піку поглинання і до уповільнення його швидкості зміщення в низькоенергетичну область. Якщо ж іон домішки знаходиться на зна-

чних відстанях від КТ, то його вплив зникає, а смуга поглинання відповідає міжрівневному поглинанню сферичної КТ без домішки. Надалі для зручності аналізу вважатимемо, що $\hbar\Gamma_{1,2} = 10^{-3}$ eV.

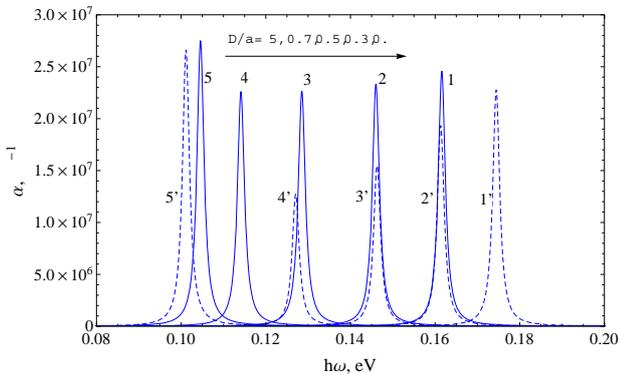


Рис.7. Залежність коефіцієнта поглинання від енергії падаючого кванта світла без врахування поляризаційних зарядів (штрихові криві 1'-5') і з врахуванням (суцільні криві 1-5). Радіус КТ $a = 40$ Å.

Аналогічні обчислення коефіцієнта поглинання проведено з врахуванням поляризаційних зарядів. З рис.7 видно, що врахування поляризаційних зарядів веде до збільшення висоти максимуму коефіцієнта поглинання для усіх випадків розташування іона домішки. При збільшенні D/a висота піків спочатку зменшується, а потім зростає, причому діапазон зміни висоти піків є меншим, ніж для випадку нехтування поляризаційних зарядів. З рисунка також видно, що врахування поляризаційних зарядів спричинює зміну розташування смуг поглинання при різних D/a у порів-

нянні з випадком $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 \equiv \varepsilon_{aver}$. Зокрема, якщо D/a є малим, то збільшення цієї величини веде до зміщення смуги поглинання у низькоенергетичну область у порівнянні з випадком нехтування поляризаційними зарядами: якщо $D/a = 0.1$, то крива 1' має максимум при $\hbar\omega = 0.174$ eV, а крива 1 – при $\hbar\omega = 0.162$ eV. Якщо ж величина $D/a > 0.9$, то подальше її зростання супроводжується зміщенням смуг поглинання у високоенергетичну область: для $D/a = 1$ максимум залежності $\alpha(\hbar\omega)$ без врахування поляризаційних зарядів буде при $\hbar\omega = 0.097$ eV, а з врахуванням – при $\hbar\omega = 0.107$ eV. У випадку дуже великих D/a смуга поглинання відповідає міжрівневному поглинанню сферичної КТ без домішки.

4. Висновки

У цій роботі проведено дослідження енергетичного спектру нецентральної домішки у сферичній КТ у рамках моделі прямокутної потенціальної ями, використовуючи метод ефективної маси, з врахуванням поляризаційних зарядів, що виникають на гетеромежах. Встановлено, що врахування цих поляризаційних зарядів веде до якісної та кількісної зміни енергетичного спектру домішки та оптичних властивостей сферичної КТ. Досліджено зміну коефіцієнта поглинання від розташування домішки у КТ. Показано, що врахування поляризаційних зарядів приводить до зміщення смуг поглинання в низькоенергетичну область для малих відстаней зміщення домішки від центра та у високоенергетичну область для великих зміщень порівняно з випадком використання середнього значення діелектричної проникності.

Бібліографія

- [1] Zhu J.L. Exact solution of hydrogenic donor states in a spherically rectangular quantum well // Phys. Rev. B. — 1989. — **39**, № 12. — P. 8780–8783.
- [2] Zhu J.L., Xiong J.J., Gu B.L. Confined electron and hydrogenic donor states in a spherical quantum dot of $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ // Phys. Rev. B. — 1990. — **41**, № 9. — P. 6001–6007.
- [3] Zhu J.L., Chen X. Spectrum and binding energy of an off-center donor in a spherical quantum dot // Phys. Rev. B. — 1994. — **50**, № 7. — P. 4497–4502.
- [4] Yang C.C., Liu L.C., and Chang S.H. Eigenstates and fine structure of a hydrogenic impurity in a spherical quantum dot // Phys. Rev. B. — 1998. — **58**, № 4. — P. 1954–1961.
- [5] Chu D.S., Hsiao C.M., and Mei W.N. Hydrogenic impurity states in quantum dots and wires // Phys. Rev. B. — 1992. — **46**, № 7. — P. 3898–3905.
- [6] Riberio F.J., Latge A. Impurities in a quantum dot: A comparative study // Phys. Rev. B. — 1994. — **50**, № 7. — P. 4913–4916.
- [7] Ткач М.В., Головацький В.А., Березовський Я.М. Спектр і хвильові функції водневоподібної домішки, розміщеної в центрі квантової точки // Фіз. і хім. тверд. тіла. — 2003. — **4**, № 2. — P. 213–220.
- [8] Li S.S., Xia J.B. Electronic states of a hydrogenic donor impurity in semiconductor nano-structures // Phys. Lett. A. — 2007. — **366**, № 1–2. — P. 120–123.
- [9] Nasria D., and Sekkal N. General properties of confined hydrogenic impurities in spherical quantum dots // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. — 2010. — **42**, № 9. — P. 2257–2263.
- [10] Mikhail I.F.I., and Ismail I.M.M. Hydrogenic impurity in a quantum dot: Comparison between the variational and strong perturbation methods // Superlattices and Microstructures. — 2010. — **48**, № 4. — P. 388–400.
- [11] Sadeghi E., and Avazpour A. Binding energy of an off-center donor impurity in ellipsoidal quantum dot with parabolic confinement potential // Physica B: Condensed Matter. — 2011. — **406**, № 2. — P. 241–244.

- [12] Rezaei G., Vahdani M.R.K., Barati. M. Polaron Effects on the Intersubband Optical Absorption Coefficient and Refractive Index Changes of an Infinite Confining Potential Quantum Box // Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics. — 2008. — **3**, № 2. — P. 159–162.
- [13] Wang G., and Guo K. Interband optical absorptions in a parabolic quantum dot // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. — 2005. — **28**, № 1. — P. 14–21.
- [14] Vahdani M.R.K., and Rezaei G. Linear and nonlinear optical properties of a hydrogenic donor in lens-shaped quantum dots // Physics Letters A. — 2009. — **373**, № 34. — P. 3079–3084.
- [15] Yakar Y., Cakir B., and Ozmen A. Calculation of linear and nonlinear optical absorption coefficients of a spherical quantum dot with parabolic potential // Optics Communications. — 2010. — **283**, № 9. — P. 1795–1800.
- [16] Xie W. Optical properties of an off-center hydrogenic impurity in a spherical quantum dot with Gaussian potential // Superlattices and Microstructures. — 2010. — **48**, № 2. — P. 239–247.
- [17] Xie W. Impurity effects on optical property of a spherical quantum dot in the presence of an electric field // Physica B: Condensed Matter. — 2010. — **405**, № 16. — P. 3436–3440.
- [18] Rezaei G., Vahdani M.R.K., and Vaseghi B. Nonlinear optical properties of a hydrogenic impurity in an ellipsoidal finite potential quantum dot // Current Applied Physics. — 2011. — **11**, № 2. — P. 176–181.
- [19] Deng Z.-Y., Guo J.-K., and Lai T.-R. Impurity states in a spherical $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ quantum dot: Effects of the spatial variation of dielectric screening // Phys. Rev. B. — 1994. — **50**, № 8. — P. 5736–5739.
- [20] Boichuk V.I., Bilynsky I.V. Bound Energy of the Wannier Exciton in Similar Heterogeneous Double Structures // Phys. Stat. Sol. — 1992. — **174**, № 1. — P. 463–470.
- [21] Бойчук В.І., Кубай Р.Ю., Білінський І.В. Вплив сил зображень на енергетичний спектр електрона у складному сферичному мікрокристалі // ЖФД. — 1999. — **3**, № 2. — С. 187–191.
- [22] Бойчук В.І., Кубай Р.Б. Влияния промежуточного слоя с переменной от координаты диэлектрической проницаемостью на энергию основного состояния электрона в сферической сложной наногетеросистеме // ФТТ. — 2001. — **43**, № 2. — С. 226–232.
- [23] Бойчук В.І., Кубай Р.Ю., Годованець Г.М., Шевчук І.С. Дослідження впливу поляризації на енергію електрона, дірки сферичної наногетеросистеми напівпровідників (на прикладі структур Si/SiO_2 , $\beta-HgS/CdS$) // ЖФД. — 2006. — **10**, № 3. — P. 220–226.
- [24] Boichuk V.I., Bilynsky I.V., Shakleina I.O., Kogoutiuk I. Dielectric mismatch in finite barrier cubic quantum dots // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. — 2010. — **43**, № 1. — P. 161–166.
- [25] Boichuk V.I., Bilynsky I.V., Leshko R. Ya. The effect of polarization charges on energy of univalent and bivalent donors in a spherical quantum dot // Condensed Matter Physics. — 2008. — **11**, № 4. — P. 653–661.
- [26] Abramowitz M. and Stegun I.A. *Handbook of mathematical function with formulas, graphs, and mathematical tables*. — Washington, D.C.: U.S. Government Printing Office, 1964. — 1046 p.