

УДК 538.958, 538.915

Показник заломлення світла сферичної квантової точки з домішкою

Бойчук В. І., Білинський І. В., 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 заломлення світла на основі міжрівневих переходів електрона донорної домішки, що індуковані поляризованим світлом. Розглянуто випадки розташування домішки у центрі та поза ним. Дослідження проведено для малих та сильних інтенсивностей світла.

1. Вступ

Добре відомо, що просторове обмеження носіїв струму у низькорозмірних гетеросистемах спричинює появу дискретного енергетичного спектру, який можна контролювати змінюючи розміри та форму наносистем. Все це дає можливість адаптовувати енергетичні спектри під бажані оптичні переходи. Ця особливість (залежність енергії від розмірів та форми) лежить в основі побудови оптичних і оптоелектронних приладів [1], зокрема лазерів з дуже вузькою шириною спектральних ліній.

Оскільки властивості масивних напівпровідникових кристалів вагомо залежать від наявності домішок у них, то наявність домішок у квантових точках (КТ) також вплине на їх властивості. На сьогодні відома значна кількість теоретичних робіт, в яких досліджено домішки у КТ [2–13]. Розглядалися сферичні [2–10], кубічні [11], еліпсоїдальні [12,13] КТ. Потенціал обмеження моделювався прямокутним [2–11, 13] потенціальним бар'єром, параболічним потенціалом [12–14] та потенціалом Гауса [8]. Оскільки рівняння Шредінгера з центральною домішкою має точні розв'язки, то, як правило, саме центральна домішка досліджувалася у більшості теоретичних робіт.

Як було зазначено вище, домішки можуть змінити оптичні властивості КТ, зокрема показник заломлення світла, що зумовлений міжрівневими переходами електрона чи дірки. Інтерес до таких переходів зумовлено можливістю їх використання при конструюванні детекторів терагерцового випромінювання [15], бо енергії таких переходів є в терагерцовому діапазоні. Це стимулювало проведення обчислень міжрівневих переходів у КТ з домішками [6, 8–10, 13, 14]. Зокрема у [10] подано залежності коефіцієнта поглинання від розташування домішки у КТ та поляризаційних зарядів. Показано, що зміщення донорної домішки від центра сферичної КТ веде до зміщення смуг поглинання світла у низькоенергетичну область. Хоча у зазначених роботах описано міжрівневі переходи у КТ з донорною домішкою, однак нелінійні оптичні властивості, що зумовлені міжрівневими переходами нецентральної домішкою, малодосліджені.

Зважаючи на це все, метою поданої роботи є:

- визначення енергетичного спектру нецентральної донорної домішки;
- обчислення лінійних та нелінійних оптичних параметрів (дипольний момент, сила осцилятора міжрівневих переходів, показник заломлення світла) КТ з нецентральною домішкою.

2. Теорія

Розглядається сферична КТ радіусом a , діелектричною проникністю ε , в якій знаходиться донорна водневоподібна домішка на відстані D від її центра. Систему координат вибрано так, що вісь z проходить через центр КТ та домішку. Гамільтоніан такої системи матиме вигляд:

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

де m^* — ефективна маса електрона у КТ,

$$W(\mathbf{r}, \mathbf{D}) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon |\mathbf{r} - \mathbf{D}|} \quad (2)$$

— кулонівська потенціальна енергія взаємодії електрона з іоном домішки, ε_0 — електрична стала. У роботі досліджується гетеросистема з КТ, що має дуже великий розрив зон, тому потенціальну енергію, що задає просторове обмеження вибрано у вигляді нескінченно глибокої потенціальної ями:

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r < a, \\ \infty, & r \geq a. \end{cases} \quad (3)$$

Оскільки розглядається гетеросистема, яка складається з кристалів з близькими значеннями діелектричних проникностей, то впливом поляризаційних зарядів можна знехтувати.

Поставлена задача точних розв'язків не має. Тому для її розв'язання використано варіаційний метод Рітца. Для побудови пробної функції використано задачу про одну частинку (електрон) у нескінченній сферичній потенціальній ямі. Хвильову функцію для основного стану (1s-стану) заряду у сферичній потенціальній ямі (без іона домішки) з нескінченим потенціалом на межі поділу середовищ можна виразити за допомогою сферичної функції Бесселя першого роду:

$$\psi_{1s}^0(r) = \sqrt{\frac{1}{2\pi a}} j_0\left(\frac{\pi r}{a}\right). \quad (4)$$

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

$$\Psi_1(\mathbf{r}) = B_1 \psi_{1s}^0(r) \exp \left[-\alpha_1 \sqrt{r^2 + D^2 - 2rD \cos \theta} \right]. \quad (5)$$

Експонента у (5) описує взаємодію електрона з позитивно зарядженим ядром домішки, α_1 — варіаційний параметр, B_1 — стала нормування, θ — кут між напрямком на іон домішки та електрон.

Енергію основного стану та варіаційні параметри знайдено мінімізацією функціоналу:

$$E_1(\alpha) = \frac{\langle \Psi_1 | \hat{H} | \Psi_1 \rangle}{\langle \Psi_1 | \Psi_1 \rangle}. \quad (6)$$

У цій роботі також варіаційним методом обчислено ще і перший збуджений стан, що належить до станів р-типу. Коли домішка знаходиться не у центрі, р-стан розщеплюється на два стани з магнітним квантовим числом $m = 0; \pm 1$ [10]. Нижчим енергетичним рівнем є стан з $m = 0$. Саме тому варіаційну хвильову функцію вибрано так:

$$\begin{aligned} \Psi_2(\mathbf{r}) &= B_2 (\cos \theta - D/c) \psi_{1p}(\mathbf{r}) \times \\ &\times \exp \left[-\alpha_2 \sqrt{r^2 + D^2 - 2rD \cos \theta} \right] = \\ &= (\cos \theta - D/c) F(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (7)$$

Тут $\psi_{1p}(\mathbf{r})$ — нормована хвильова функція 1p-стану електрона у нескінченно глибокій сферично-симетричній прямокутній потенціальній ямі без домішки, α_2 — варіаційний параметр, B_2 — стала нормування, c — деяка стала, що визначатиметься з умови ортогональності функцій (5) та (7). З умови ортогональності

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

знаходимо

$$c = D \frac{\int d\mathbf{r} \Psi_1^*(\mathbf{r}) F(\mathbf{r})}{\int d\mathbf{r} \Psi_1^*(\mathbf{r}) \cos \theta F(\mathbf{r})}. \quad (8)$$

Коефіцієнт c згідно (8) залежить лише від варіаційного параметра α_2 , бо $F(\mathbf{r})$ залежить від цього ж параметра, а $\Psi_1(\mathbf{r})$ вже повністю визначена для основного стану. Далі (8) підставляємо в 7. Таким чином, варіаційна хвильова функція залежатиме лише від одного варіаційного параметра α_2 . Тому мінімізацією функціоналу типу (6) можна знайти енергію нецентральної домішки для першого збудженого стану та варіаційний параметр.

Визначивши хвильові функції основного та першого збудженого станів, обчислено оптичні властивості КТ з домішкою. Вважаємо, що КТ опромінюють монохроматичним світлом частотою ω , інтенсивністю I , яке лінійно поляризоване вздовж осі z .

Для дворівневої системи дипольний момент переходу можна подати у вигляді:

$$M_{1,2} = \langle 2 | e z | 1 \rangle = \int d\mathbf{r} \Psi_2^*(\mathbf{r}) e r \cos \theta \Psi_1(\mathbf{r}), \quad (9)$$

а силу осцилятора записати так:

$$f_{1,2} = \frac{2m^*}{e^2 \hbar^2} (E_2 - E_1) |M_{1,2}|^2. \quad (10)$$

Показник заломлення світла нанокристалом, що зумовлений міжрівневим переходом з основного стану у перший збуджений стан визначено на основі формули з [6]:

$$\frac{\Delta n(\omega)}{n_r} = \frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r} + \frac{\Delta n^{(3)}(\omega, I)}{n_r}, \quad (11)$$

де перший доданок описує лінійний показник заломлення світла:

$$\frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r} = \frac{1}{2\epsilon\epsilon_0} \frac{\sigma |M_{1,2}|^2 (E_2 - E_1 - \hbar\omega)}{(E_2 - E_1 - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma)^2}, \quad (12)$$

а другий — нелінійний, третього порядку [6], що залежить від інтенсивності світла:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta n^{(3)}(\omega)}{n_r} &= -\frac{\mu_0 c I}{4\epsilon^{3/2}\epsilon_0} \frac{\sigma |M_{12}|^2}{\left[(E_{21} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma)^2 \right]^2} \times \\ &\times \left\{ 4(E_{21} - \hbar\omega) |M_{12}|^2 - \frac{(M_{22} - M_{11})^2}{(E_{21})^2 + (\hbar\Gamma)^2} \times \right. \\ &\times \left\{ (E_{21} - \hbar\omega) \left[E_{21} (E_{21} - \hbar\omega) - (\hbar\Gamma)^2 \right] + \right. \\ &\left. \left. - (\hbar\Gamma)^2 (2E_{21} - \hbar\omega) \right\} \right\} \quad (13) \end{aligned}$$

де $E_{21} = E_2 - E_1$, μ_0 — магнітна стала, c — швидкість світла, $\hbar\Gamma$ — енергія релаксації, що зумовлена електрон-фононою взаємодією та іншими факторами розсіювання. Вважаємо, що КТ знаходиться при низьких температурах, поверхня її є ідеальною, тому параметр можна оцінити як ширину енергетичних рівнів, величина яких зумовлена розсіюванням на акустичних фононах. Якщо розглянути температуру системи $T = 20$ К, то $\hbar\Gamma \sim 1.7$ meV. Густина зарядів у КТ σ вибрано на основі припущення, що у КТ може знаходитись лише 1 електрон (домішковий електрон), тому $\sigma = 3/(4\pi a^3)$.

Отже, на основі поданих вище формул проведено обчислення енергії домішки та оптичні параметри.

3. Аналіз результатів

Усі обчислення проведено для КТ CdS, параметри якої такі: $m^* = 0.2m_e$, $\epsilon = 5.5$, $a = 40$ Å. Результати залежності енергії домішки від її розташування у КТ подано на рис.1.

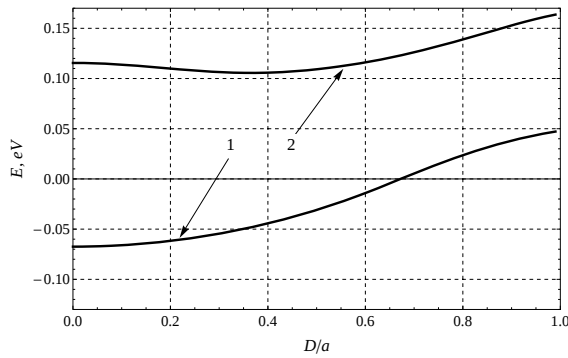


Рис. 1. Енергія основного та першого збудженого станів домішки у КТ

На графіку подано енергію основного стану (крива 1) та першого збудженого (крива 2). Як видно з рисунка, зменшення домішки до краю КТ веде до монотонного зростання енергії основного стану системи та до немонотонного зростання енергії першого збудженого. Причиною цього є різна зміна кулонівської енергії взаємодії іона домішки та електрона для різних станів при зміщенні іона домішки. Аналогічні якісні результати отримано і в роботі [10].

Для обчислення оптичних властивостей використовуються варіаційні функції (5), (7). На рис. 2, 3 подано графіки залежності квадрату матричного елемента дипольного моменту міжрівневих переходів домішкового електрона та сили осцилятора переходу $f_{1,2}$ від розташування домішки у КТ відповідно.

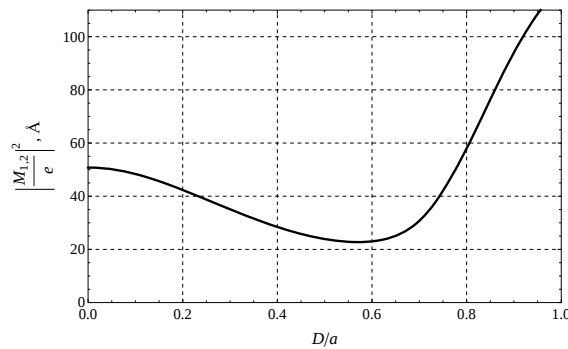


Рис. 2. Квадрат матричного елемента дипольного моменту міжрівневих переходів

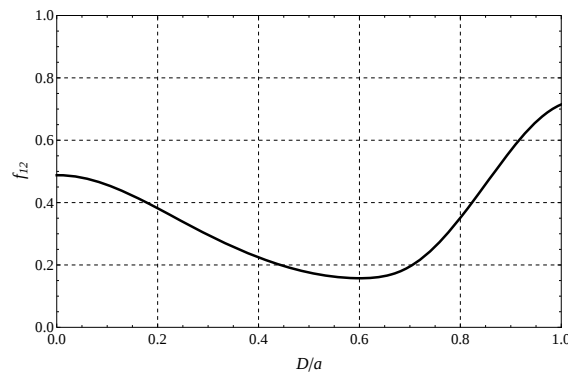


Рис. 3. Сила осцилятора переходу електрона з основного у перший збуджений стан

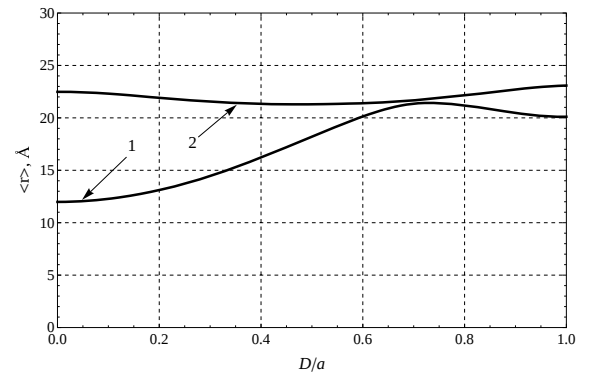


Рис. 4. Середня відстань для домішкового електрона 1 — середня відстань основного стану, 2 — першого збудженого

З графіків видно немонотонні залежності зазначених величин. Їх можна пояснити зміною просторового розташування електрона при зміні D/a (рис. 4).

З рис. 3 видно, що зменшення D/a веде до того, що сила осцилятора $f_{1,2}$ прямує до відповідних величин, які можна одержати у задачі центральної водневоподібної домішки у сферичній КТ. Середня відстань електрона в основному стані є найближчою до середньої відстані електрона у збудженому стані при $D/a = 0.7$ (рис. 4). Саме тому поблизу цієї точки спостерігається мінімум у залежності $|M_{1,2}/e|^2$ та $f_{1,2}$ від D/a . Саме це і відобразиться на залежності показника заломлення світла від енергії падаючого кванта в околі резонансних енергій.

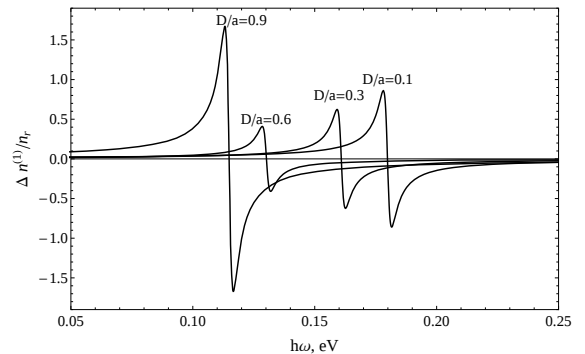


Рис. 5. Лінійний показник заломлення світла

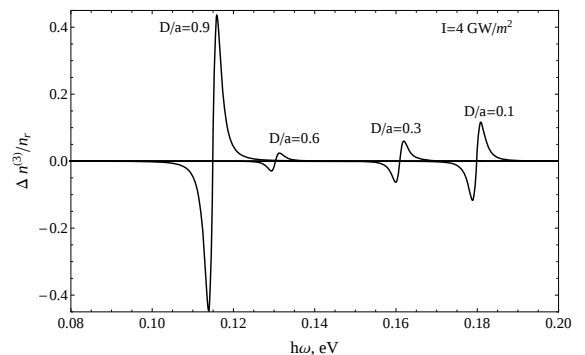


Рис. 6. Нелінійний показник заломлення світла

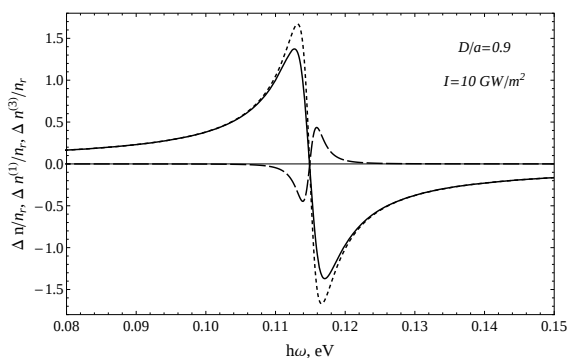


Рис. 7. Лінійний (пунктирна крива), нелінійний (штрихова крива) та повний (суцільна крива) показник заломлення світла.

На рис.5, 6 подано графіки залежності лінійного та нелінійного третього порядку коефіцієнтів заломлення світла як функції енергії падаючого кванта. При обчисленнях вважалося, що КТ сферична КТ з донорною домішкою опромінюється світлом інтенсивністю $I = 4 \text{ ГВт/м}^2$. З графіка видно, що віддалення домішки від центра КТ веде до зміщення резонансних енергій у низькоенергетичну область. Причиною такої залежності є зменшення відстані між енергетичними рівнями основного та першого збудженого станів. Якщо ж збіль-

шувати інтенсивність світла, то характерна немонотонність нелінійного показника заломлення зростатиме і стане значною, що видно на рис.7.

4. Висновки

Отже, у цій роботі проведено теоретичне дослідження сферичної КТ з нецентральною водневоподібною донорною домішкою, що дозволило встановити:

- залежність енергетичного спектру нецентральної донорної домішки від розташування домішки у КТ і показати, що зміщення домішки від центра КТ веде до зростання енергії;
- залежність квадрату матричного елемента дипольного моменту, сили осцилятора міжрівневих переходів від розташування домішки, що значною мірою залежать від просторового розподілу густини ймовірності для електрона в різних станах;
- лінійний та нелінійний оптичні коефіцієнти заломлення світла, яке зумовлене міжрівневими переходами електрона у КТ з нецентральною домішкою і показати, що зміщення домішки від центра КТ веде до зміщення характерних резонансних максимумів у низькоенергетичну область.

Бібліографія

- [1] Grundmann M., Bimberg D., Ledentsov N. *Quantum Dot Heterostructures*. — Chichester: Wiley, 1998. — 338 с.
- [2] 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.
- [3] 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.
- [4] 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.
- [5] Boichuk V.I., Bilynskyi 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.
- [6] 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.
- [7] 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.
- [8] 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.
- [9] 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.
- [10] Boichuk V.I., Bilynskyi I.V., Leshko R.Ya., Turyanska L.M. The effect of the polarization charges on the optical properties of a spherical quantum dot with an off-central hydrogenic impurity // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. — 2011. — **44**, № 2. — P. 476–482.
- [11] Shu-Shen Li, Jian-Bai Xia. Electronic states of a hydrogenic donor impurity in semiconductor nano-structures // *Phys. Lett. A*. — 2007. — **366**, № 1–2. — P. 120–123.
- [12] 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.
- [13] 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.
- [14] Yakar Y., Kahir 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.
- [15] Wei Wu, Dibyendu Dey and Hooman Mohseni. A voltage tunable quantum dot photodetector for terahertz detection // *J. Phys. D*. — 2010. — **43**. — P. 155101(6 pages).