

## ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ЕКСИТОНА В СФЕРИЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧКАХ

Розроблено теорію розрахунку спектра екситону у складних сферичних відкритих та закритих квантових точках. У випадку, коли ефективна маса дірки значно більша за ефективну масу електрона, при невеликих розмірах квантової точки отриманий вигляд радіальної частини хвильової функції електрона у кожному шарі квантової точки та в кожній з областей енергій. Записані дисперсійні рівняння для закритих квантових точок та вирази для знаходження матриці розсіювання у відкритих квантових точках. Виконано числові розрахунки для безмежно глибокої потенціальної ями. Отриманий екситонний спектр у граничному випадку слабкої кулонівської взаємодії збігається з відомим електронним спектром.

The theory performed for calculation exciton spectrum in complicated spherical opened and closed quantum dots (QD). The analytical form of radial part of electron wave function in every shell of QD and every range of energy is obtained in the case hole effective mass is much greater than electron effective mass for small QD. The dispersion equations for closed QD and equation for scattering matrix are obtained. The numerical calculations are performed for infinity depth potential well. Obtained exciton spectrum agrees with well-known electron spectrum in limiting case very weak Coulomb interaction.

### Вступ

Величезна кількість наукових робіт, присвячених дослідженню напівпровідникових наносистем, яскраво засвідчує зростання уваги до цього нового напрямку фізики. Поява сучасних технологій вирощування напівпровідникових матеріалів, таких як хімічно-парове осадження, рідинно-фазова епітаксія та молекулярно-променева епітаксія, зумовила можливість отримання різноманітних як за геометричною формою, так і за матеріальним складом наноструктур. Складність теоретичного вивчення різноманітних наноконструкцій полягає в наявності складних границь розділу середовищ, що приводить до громіздких математичних формул та потребує потужної обчислювальної техніки.

На даний час теоретичні дослідження наносистем виконуються, ґрунтуючись на двох основних підходах. Одним з них є опис наносистем, виходячи з перших принципів [1-6], його ще називають мікроскопічним наближенням. В такому підході необхідно враховувати положення кожного атома наносистеми. У випадку обмеження в одному напрямку (квантові ями) враховують декілька сотень атомів. При дослідженні наносистем, обмежених в трьох напрямках (квантові точки), враховують аж до мільйона атомів [6].

Зрозуміло, що в рамках такого підходу для найпростіших наносистем вдається отримати лише енергетичні спектри для електронів та дірок чи коливні спектри для фононів.

Найбільш поширеним на цей час є другий підхід, всі різновиди якого по суті зводяться до макроскопічного наближення, оскільки він ґрунтується на використанні таких макроскопічних параметрів, як ефективна маса та діелектрична проникність напівпровідникових матеріалів, з яких складається наносистема.

Лише в рамках макроскопічного підходу побудовано теорію електронного та діркового енергетичних спектрів у багатошарових сферичних напівпровідникових наносистемах [7-12].

У роботах [8,13,14] показано, що в залежності від відношення величин потенціальних енергій електрона чи дірки в зовнішньому середовищі до потенціальних енергій у внутрішніх шарах складної сферичної наносистеми складні сферичні квантові точки поділяють на відкриті та закриті.

Закриті напівпровідникові квантові точки, які досліджуються вже майже двадцять років, характеризуються дискретним електронним та дірковим спектрами. Квазічастинки, перебуваючи в дискретних станах, локалізовані в квантовій точці.

Недавно почалось дослідження відкритих сферичних і циліндричних наносистем [13,14]. Вільні

електрони та дірки, що знаходяться у відкритих наносистемах, завдяки квантовому тунелюванню можуть розсіюватись і рухатись на безмежність. Такі стани електронів та дірок називають квазістаціонарними, вони характеризуються як величиною енергії, так і часом життя. Дослідження квазістаціонарних станів у сферичних та циліндричних квантових точках виконуються за допомогою матриці розсіяння. Теорія матриці розсіяння розроблена в середині ХХ століття у рамках ядерної фізики [15-16], а на початку ХХІ століття модифікована на випадок напівпровідникових сферичних наносистем. При побудові теорії електронного чи діркового спектрів у закритих та відкритих наносистемах вважалось, що в наносистемі є вільний електрон чи дірка. В реальних експериментальних умовах вільний електрон з'являється в результаті його збудження квантом світла. При появі електрона на одному з дискретних рівнів квантової точки, на відповідному дискретному рівні з'являється і дірка, яка в умовах просторового обмеження взаємодіє з електроном, що відображається на їхніх енергетичних спектрах. Така електрон-діркова взаємодія за природою схожа на локалізований екситон типу Ваньє-Мотта в масивному напівпровіднику, але при наявності сильного розмірного квантування має свої особливості.

Дослідження екситонів Ваньє-Мотта у квантових точках виконувались в багатьох роботах методом ВКБ [17-23], теорії збурень [24-25], варіаційним методом [26]. Кожний з цих методів має свої переваги та недоліки, але їх застосування дуже проблематичне у випадку відкритих квантових точок.

Метою даної роботи є розробка методу розрахунку енергій та часів життя квазістаціонарних станів електрона, взаємодіючого з діркою як у закритих, так і у відкритих сферичних напівпровідникових наносистемах.

**Гамільтоніан задачі. Рівняння Шредінгера**

Розглянемо екситон, який знаходиться у складній сферичній наногетеросистемі (рис. 1а).

Будемо вважати, що ефективна маса дірки набагато більша за ефективну масу електрона. Тоді електрон та дірка, знаходячись у потенціалі, створеному наносистемою, взаємодіють між собою і здійснюють рух навколо спільного центра мас.

Вважаємо, що ядро наносистеми утворює для дірки потенціальну яму. Тоді, при малих розмірах ядра та великій ямі, дірка зі значною ймовірністю буде знаходитись в центрі наносистеми, а електрон, враховуючи співвідношення мас, рухати-

меться навколо неї. Спочатку розглянемо закрити сферичну наносистему, потенціальна енергія електрона в якій без врахування його взаємодії з діркою матиме вигляд, зображений на рис. 1б. Початок відліку енергії виберемо так, щоб потенціальна енергія електрона в ядрі  $V_0=0$  ( $r < r_0$ ). Потенціал оболонки ( $r_0 \leq r < r_1$ )  $V_1 > V_0$  і потенціал зовнішнього середовища  $V_2 > V_1 > V_0$  ( $r \geq r_2$ ) ( $r_0$  – радіус ядра і  $r_1$  – загальний радіус квантової точки відповідно,  $r_1 - r_0$  – товщина оболонки). Згідно із наближенням ефективних мас, гамільтоніан системи можна записати як

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

де

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < r_0 \\ V_1 & r_0 \leq r < r_1 \\ V_2 & r \geq r_1 \end{cases}, \quad (2)$$

потенціал розмірного квантування. Ефективна маса електрона є функцією відстані до центра квантової точки

$$m(r) = \begin{cases} m_0 & r < r_0 \\ m_1 & r_0 \leq r < r_1 \\ m_2 & r \geq r_1 \end{cases}, \quad (3)$$

$\epsilon$  – усереднене значення діелектричної постійної матеріалу наносистеми.

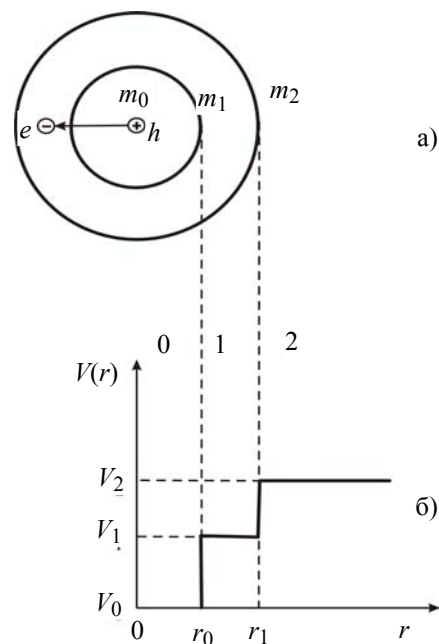


Рис. 1. Геометрична схема сферичної наносистеми (а), (б) потенціал електрона в наносистемі (б).

Рівняння Шредінгера запишемо в сферичних координатах  $(r, \theta, \varphi)$ :

$$H\Psi(r, \theta, \varphi) = E\Psi(r, \theta, \varphi),$$

набуває вигляду:

$$-\frac{\hbar^2}{2m(r)} \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \Psi - \frac{e^2}{\varepsilon r} \Psi + V(r) \Psi = E \Psi. \quad (4)$$

Подамо  $\Psi(r, \theta, \varphi)$  у вигляді

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi),$$

де функція  $\Theta(\theta)$  може бути записана як приєднаний поліном Лежандра, а  $\Phi(\varphi) = e^{im\varphi}$ ,  $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$ , рівняння для радіальної частини записується так:

$$-\frac{\hbar^2}{2m(r)} \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L(L+1)}{r^2} \right] R(r) - \frac{e^2}{\varepsilon r} R(r) + V(r)R(r) = ER(r). \quad (5)$$

Враховуючи залежності  $V(r)$ ,  $m(r)$  рівняння (5) доцільно розглядати окремо для трьох областей сферичної наносистеми:

(1) Для  $r < r_0$ ,  $V(r)=0$ ,  $m(r)=m_0$ . Рівняння (5) буде таке:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L(L+1)}{r^2} \right] R(r) - \frac{e^2}{\varepsilon r} R(r) = ER(r). \quad (6)$$

Якщо б електрон знаходився лише в потенціалі розмірного квантування, то його дискретні стани мали б додатні енергії. У випадку наявності ще й кулонівського притягуючого потенціалу можливе існування зв'язаних станів з від'ємною енергією. Отже, розв'язки рівняння (6) можуть бути у двох областях енергій, які ми дослідимо окремо:

а). Для від'ємних енергій,  $E < 0$ . Уведемо такі позначення

$$\alpha_{1a}^2 = -8m_0 E / \hbar^2 > 0,$$

$$\xi = \alpha_{1a} r, \lambda_1 = 2m_0 e^2 / \varepsilon \hbar^2 \alpha_{1a}.$$

У результаті рівняння (6) у нових змінних матиме вигляд

$$\frac{\partial^2 R}{\partial \xi^2} + \frac{2}{\xi} \frac{\partial R}{\partial \xi} + \left( -\frac{1}{4} + \frac{\lambda_1}{\xi} - \frac{L(L+1)}{\xi^2} \right) R = 0. \quad (7)$$

Якщо надалі ми запишемо  $R(\xi) = \xi^{-1} W(\xi)$ , то

рівняння (7) приведемо до

$$\frac{\partial^2 W}{\partial \xi^2} + \left( -\frac{1}{4} + \frac{\lambda_1}{\xi} + \frac{1}{4} - \frac{\left( L + \frac{1}{2} \right)^2}{\xi^2} \right) W = 0. \quad (8)$$

Рівняння (8) є рівнянням Уіттекера [27,28], яке має два лінійно незалежні розв'язки:

$$W_{\lambda_1, L}(\xi) = e^{-\xi/2} \xi^{L+1} \Phi(L+1 - \lambda_1, 2L+2, \xi), \quad (9)$$

$$W_{\lambda_1, -L}(\xi) =$$

$$= e^{-\xi/2} \xi^{-L+1} \Phi(-L+1 - \lambda_1, -2L+2, \xi), \quad (10)$$

де  $\Phi(a, b, x)$  – вироджена гіпергеометрична функція

$$\Phi(a, b, x) = 1 + \frac{a x}{b \Gamma(b)} + \frac{a(a+1) x^2}{b(b+1) 2!} + \dots + \frac{a(a+1)\dots(a+k) x^k}{b(b+1)\dots(b+k) k!} + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_k x^k}{(b)_k k!}. \quad (11)$$

Розв'язок рівняння (7) запишеться у вигляді

$$R(\xi) = \xi^{-1} W_{\lambda_1, L}(\xi) = e^{-\xi/2} \xi^L \Phi(L+1 - \lambda_1, 2L+2, \xi), \quad (12)$$

або

$$R(\xi) = \xi^{-1} W_{\lambda_1, -L}(\xi) = e^{-\xi/2} \xi^{-L} \Phi(-L+1 - \lambda_1, -2L+2, \xi). \quad (13)$$

Хвильова функція повинна бути обмеженою скрізь, тому розв'язок радіальної частини в області  $r < r_0$  можна записати так

$$R_1(\alpha_{1a} r) = C_{1a} e^{-\alpha_{1a} r/2} (\alpha_{1a} r)^L = \Phi(L+1 - \lambda_1, 2L+2, \alpha_{1a} r), \quad (14)$$

де  $C_{1a}$  – постійна нормування.

б). Для аналізу спектрів додатних енергій та хвильових функцій у області  $E > 0$ , уведемо наступні позначення

$$\alpha_{1b}^2 = 2m_0 E / \hbar^2 > 0, \quad \xi = \alpha_{1b} r,$$

$$\beta_1 = -\mu e^2 / \varepsilon \hbar^2 \alpha_{1b},$$

тоді рівняння (6) переписується у вигляді

$$\frac{\partial^2 R}{\partial \xi^2} + \frac{2}{\xi} \frac{\partial R}{\partial \xi} + \left( 1 - \frac{\beta_1}{\xi} - \frac{L(L+1)}{\xi^2} \right) R = 0. \quad (15)$$

Якщо перейти до нової функції  $F(\xi) = \xi R(\xi)$ , то (15) набуває вигляду

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \xi^2} + \left( 1 - \frac{\beta_1}{\xi} - \frac{L(L+1)}{\xi^2} \right) F = 0. \quad (16)$$

Рівняння (16) називається хвильовим рівнянням [29]. Воно має два лінійно незалежні розв'язки  $F_{\beta_1, L}(\xi)$  і  $G_{\beta_1, L}(\xi)$ , які називають регулярною і нерегулярною функціями Кулона відповідно. Регулярна функція Кулона виражається через вироджену гіпергеометричну функцію

$$F_{\beta_1, L}(\xi) = \xi^{L+1} \Phi_{\beta_1, L}(\xi), \quad (17)$$

$$\Phi_{\beta_1, L}(\xi) = \sum_{k=L+1}^{\infty} A_k^L(\beta_1) \xi^{k-L-1}. \quad (18)$$

Рекурентні співвідношення для коефіцієнтів мають наступний вигляд:

$$A_{L+1}^L(\beta_1) = 1, \quad (19)$$

$$A_{L+2}^L(\beta_1) = \frac{\beta_1}{L+1}, \quad (20)$$

$$A_k^L(\beta_1) = \frac{2\beta_1 A_{k-1}^L(\beta_1) - A_{k-2}^L(\beta_1)}{(k+L)(k-L-1)}, \quad (21)$$

при  $k > L+2$ .

Нерегулярна кулонівська функція  $G_{\beta_1, L}(\xi)$  досить складно визначається через регулярну кулонівську функцію  $F_{\beta_1, L}(\xi)$  та громіздки поліноми

$$G_{\beta_1, L}(\xi) = \frac{\beta_1}{C_0^2(\beta_1)} \times F_{\beta_1, L}(\xi) \left( \ln(2\xi) + \frac{q_L(\beta_1)}{p_L(\beta_1)} \right) + \theta_{\beta_1, L}(\xi), \quad (22)$$

де

$$C_0^2(\beta_1) = 2\pi\beta_1(e^{2\pi\beta_1} - 1)^{-1},$$

$$\theta_{\beta_1, L}(\xi) = D_L(\beta_1)\xi^{-L}\Psi_{\beta_1, L}(\xi),$$

$$D_L(\beta_1) C_L(\beta_1) = \frac{1}{2L+1},$$

$$\Psi_{\beta_1, L}(\xi) = \sum_{k=-L}^{\infty} a_k^L(\beta_1)\xi^{k+L},$$

$$a_{-L}^L = 1, \quad a_{-L+1}^L = 0,$$

$$(k-L-1)(k+L)a_k^L =$$

$$= 2\beta_1 a_{k-1}^L - a_{k-2}^L - (2k-1)p_L(\beta_1)A_k^L,$$

$$\frac{q_L(\beta_1)}{p_L(\beta_1)} = \sum_{s=1}^L \frac{s}{s^2 + \beta_1^2} - \sum_{s=1}^{2L+1} \frac{1}{s} +$$

$$+ \operatorname{Re} \left[ \frac{\Gamma'(1+i\beta_1)}{\Gamma(1+i\beta_1)} \right] + 2\gamma + \frac{r_L(\beta_1)}{p_L(\beta_1)},$$

$$r_L(\beta_1) = \frac{(-1)^{L+1}}{(2L)!} \operatorname{Im} \left[ \frac{1}{2L+1} + \frac{2(i\beta_1-L)}{2L(!)} + \right.$$

$$\left. + \frac{2^2(i\beta_1-L)(i\beta_1-L+1)}{(2L-1)(2!)} + \dots \right. \\ \left. \dots + \frac{2^{2L}(i\beta_1-L)(i\beta_1-L+1)\dots(i\beta_1+L-1)}{(2L)!} \right].$$

Функція  $G_{\beta_1, L}(\xi)$  розбіжна в точці  $\xi=0$ , тому хвильову функцію радіальної частини в області  $E > 0$  запишемо так:

$$R_1(\alpha_{1b}r) = C_{1b} \sum_{k=L+1}^{\infty} A_k^L(\beta_1)(\alpha_{1b}r)^{k-1}, \quad (23)$$

де  $C_{1b}$  – постійна нормування.

в). Для нульової енергії  $E=0$ . Підставляємо  $E=0$  у рівняння (6), отримаємо

$$r^2 \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial R(r)}{\partial r} + \left( -L(L+1) + \frac{2\mu e^2}{\varepsilon \hbar^2} r \right) R(r) = 0. \quad (24)$$

Порівнюючи (24) з модифікованим рівнянням Бесселя

$$r^2 \frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2} + (1-2\omega)r \frac{\partial u(r)}{\partial r} + \left( \omega^2 - \nu^2 \gamma^2 + \alpha^2 \gamma^2 r^{2\gamma} \right) u(r) = 0, \quad (25)$$

встановимо  $\omega = -1/2$ ,  $\alpha_{1c}^2 = 8\mu e^2 / \varepsilon \hbar^2$ ,  $\nu = 2L+1$ ,  $\gamma = 1/2$ , тоді розв'язки рівняння (25) можна записати у вигляді лінійних комбінацій

$$u(\alpha_{1c}r) = r^{\omega} [C_{1c} J_{\nu}(\alpha_{1c}r^{\gamma}) + C_{1c} N_{\nu}(\alpha_{1c}r^{\gamma})], \quad (26)$$

де  $J_{\nu}(\alpha_{1c}r^{\gamma})$  – функція Бесселя та  $N_{\nu}(\alpha_{1c}r^{\gamma})$  – функція Неймана. Оскільки радіальна функція повинна бути обмеженою для  $L=0$ , радіальна частина хвильової функції може бути записана у вигляді

$$R_1(\alpha_{1c}r) = C_{1c} r^{-1/2} J_{2L+1} \left( \sqrt{\frac{8\mu e^2}{\varepsilon \hbar^2}} r^{1/2} \right). \quad (27)$$

(II) Для  $r_0 \leq r < r_1$ ,  $V(r) = V_1$ ,  $m(r) = m_1$ . Диференціальне рівняння для радіальної частини  $R(r)$  можна записати так:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L(L+1)}{r^2} \right] R(r) - \frac{e^2}{\varepsilon r} R(r) + V_1 R(r) = ER(r). \quad (28)$$

Уведемо таке позначення

$$\alpha_2^2 = -8\mu(E - V_1) / \hbar^2 > 0,$$

$$\xi = \alpha_2 r, \lambda_2 = 2m_1 e^2 / \epsilon \hbar^2 \alpha_2,$$

$$R(\xi) = \xi^{-1} W(\xi),$$

тоді (28) можна переписати в наступному вигляді

$$\frac{\partial^2 W}{\partial \xi^2} + \left( -\frac{1}{4} + \frac{\lambda_2}{\xi} + \frac{\frac{1}{4} - \left(L + \frac{1}{2}\right)^2}{\xi^2} \right) W = 0. \quad (29)$$

Це рівняння Уіттекера і його розв'язок може бути записаний лінійною комбінацією функцій (12) і (13):

$$\begin{aligned} R_2(\alpha_2 r) = & C_{21} e^{-\alpha_2 r/2} (\alpha_2 r)^L \Phi(L+1-\lambda_2, 2L+2, \alpha_2 r) \\ & + C_{22} e^{-\alpha_2 r/2} (\alpha_2 r)^L \times \\ & \times \left\{ \Phi(L+1-\lambda_2, 2L+2, \alpha_2 r) \ln(\alpha_2 r) + \right. \\ & \left. + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(L+1-\lambda_2)_k}{(2L+2)_k} \times \right. \\ & \left. \times [\Phi(L+1-\lambda_2+k) - \Phi(2L+2+k) - \Phi(1+k)] + \right. \\ & \left. + \frac{\Gamma(2L+1)\Gamma(2L+2)\Gamma(-L-\lambda_2)(-1)^{2L+2}}{\Gamma(L+1-\lambda_2)} \times \right. \\ & \left. \times \sum_{k=0}^{2L} \frac{(-L-\lambda_2)_k}{(-2L)_k} \frac{(\alpha_2 r)^{k-2L-1}}{k!} \right\}, \end{aligned}$$

де  $C_{21}, C_{22}$  – постійні нормування.

(III) Для  $r > r_1$ ,  $V(r) = V_2$ ,  $m(r) = m_2$ . Диференційне рівняння для радіальної частини  $R(r)$  матиме вигляд:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_2} \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L(L+1)}{r^2} \right] R(r) - \\ - \frac{e^2}{\epsilon r} R(r) + V_2 R(r) = ER(r). \quad (30) \end{aligned}$$

Уведемо такі позначення

$$\alpha_3^2 = -8m_2(E - V_2) / \hbar^2 > 0,$$

$$\xi = \alpha_3 r, \lambda_3 = 2m_2 e^2 / \epsilon \hbar^2 \alpha_3,$$

$$R(\xi) = \xi^{-1} W(\xi),$$

тоді отримаємо

$$\frac{\partial^2 W}{\partial \xi^2} + \left( -\frac{1}{4} + \frac{\lambda_3}{\xi} + \frac{\frac{1}{4} - \left(L + \frac{1}{2}\right)^2}{\xi^2} \right) W = 0. \quad (31)$$

Це рівняння Уіттекера. В досліджуваній області лише один з двох його незалежних розв'язків

(9) задовольняє граничну умову, накладену на радіальну частину хвильової функції. Оскільки функція Уіттекера у вигляді (9) має складну поведінку при дуже великих  $\xi$ , то при розрахунках будемо використовувати інтегральне зображення функції Уіттекера

$$\begin{aligned} W_{\lambda_3, L}(\xi) = \\ = C_3 e^{-\xi/2} \xi^{\lambda_3} \int_0^{\infty} e^{-t} t^{-\lambda_3+L} \left(1 + \frac{t}{\xi}\right)^{\lambda_3+L} dt. \quad (32) \end{aligned}$$

Тепер радіальна частина хвильової функції в області  $r > r_1$  може бути записана у вигляді

$$\begin{aligned} R_3(\alpha_3 r) = C_3 e^{-\alpha_3 r/2} (\alpha_3 r)^{\lambda_3-1} \times \\ \times \int_0^{\infty} e^{-t} t^{-\lambda_3+L} \left(1 + \frac{t}{\alpha_3 r}\right)^{\lambda_3+L} dt. \quad (33) \end{aligned}$$

Із граничних умов, яким задовольняють хвильові функції і потік густини ймовірності електрона, отримуємо наступні рівняння відповідно для першої та другої меж поділу середовищ:

$$\frac{R'_1(\alpha_1 a)}{m_0 R_1(\alpha_1 a)} = \frac{R'_2(\alpha_2 a)}{m_1 R_2(\alpha_2 a)}, \quad (34)$$

$$\frac{R'_2(\alpha_2 b)}{m_1 R_2(\alpha_2 b)} = \frac{R'_3(\alpha_3 b)}{m_2 R_3(\alpha_3 b)}. \quad (35)$$

Похідні, що входять у рівняння (34) та (35), зручно записати, використовуючи наступні рекурентні формули для хвильових функцій Кулона:

$$L \frac{du_L}{d\rho} = (L^2 + \eta^2)^{1/2} u_{L-1} - \left( \frac{L^2}{\rho} + \eta \right) u_L, \quad (36)$$

$$\begin{aligned} (L+1) \frac{du_L}{d\rho} = \left[ \frac{(L+1)^2}{\rho} + \eta \right] u_L - \\ - \left[ (L+1)^2 + \eta^2 \right]^{1/2} u_{L+1}, \quad (37) \end{aligned}$$

де  $u_L = F_{\beta_1, L}(\xi)$  чи  $u_L = G_{\beta_1, L}(\xi)$

та для виродженої гіпергеометричної функції, яка входить у функції Уіттекера (9) та (10)

$$\frac{d\Phi(\alpha, \gamma, z)}{dz} = \frac{\alpha}{\gamma} \Phi(\alpha+1, \gamma+1, z). \quad (38)$$

Для нерегулярної функції Кулона  $G_{\beta_1, L}(\xi)$ , яка задається складним для числового розрахунку виразом (22), зручно використовувати її інтегральні зображення

$$\begin{aligned} F_L(\eta, \rho) + iG_L(\eta, \rho) = \frac{ie^{i\rho} \rho^{-L}}{(2L+1)! C_L(\eta)} \times \\ \times \int_0^{\infty} e^{-t} t^{L-i\eta} (t+2i\rho)^{L+i\eta} dt, \quad (39) \end{aligned}$$

$$F_L(\eta, \rho) - iG_L(\eta, \rho) = \frac{e^{-\pi\eta\rho} \rho^{L+1}}{(2L+1)! C_L(\eta)} \times \int_{-i}^{-i\infty} e^{-i\rho t} (1-t)^{L-i\eta} (1+t)^{L+i\eta} dt. \quad (40)$$

Рівняння (34,35) разом з умовою нормування хвильової функції дають можливість знайти невідомі коефіцієнти  $C_1, C_{21}, C_{22}, C_3$ , а умова сумісності системи однорідних лінійних рівнянь (34,35) є дисперсійним рівнянням, з якого отримуються власні значення  $E$ , тобто дискретний енергетичний спектр електрона, який взаємодіє з важкою діркою, розміщеною в центрі наносистеми.

Якщо потенціальна енергія електрона в зовнішньому середовищі  $V_2$  буде менша за потенціальну енергію  $V_1$ , сферична наносистема буде відкритою. Покладемо  $V_2=0, m_2=m_0$ , отримаємо найпростішу відкриту наносистему.

Рівняння Шредінгера в області  $r \geq r_1$  матиме вигляд (15) і може бути зведеним до хвильового рівняння Кулона (16). Отже, хвильова функція в зовнішньому середовищі може бути записана через два лінійно незалежні розв'язки  $F_{\beta_1, L}(\xi)$  і  $G_{\beta_1, L}(\xi)$  рівняння Кулона.

Оскільки для відкритої наносистеми радіальна частина хвильової функції на великих відстанях від її центра відмінна від нуля, то знайти невідомі коефіцієнти і розрахувати енергетичний спектр наведеним вище методом неможливо.

Для відкритої сферичної наносистеми краще користуватись не самими кулонівськими функціями, а їх лінійними комбінаціями:

$$\chi_{kL}^{(+)}(r) = G_L + iF_L, \quad (41)$$

$$\chi_{kL}^{(-)}(r) = G_L - iF_L. \quad (42)$$

Функції (41) та (42) відповідно описують потоки квазічастинок, які розбігаються і збігаються до центру сферичної наносистеми. В цьому легко переконатися, розрахувавши потік за формулою

$$\vec{j}(\vec{r}) = -\frac{i\hbar}{2m(r)} (\psi * \vec{\nabla}\psi - \psi \vec{\nabla}\psi^*). \quad (44)$$

При додатних енергіях загальний розв'язок рівняння Шредінгера в області  $r \geq r_1$  згідно з теорією розсіювання можна записати у вигляді

$$\chi_{kL}(r) = A_L(k) \left[ \chi_{kL}^{(-)}(r) - S_L(k) \chi_{kL}^{(+)}(r) \right], \quad (45)$$

де коефіцієнт  $A_L(k)$  визначається умовою нормування, а  $S_L(k)$  – матриця розсіювання. Досліджуючи полюси  $S$ -матриці, можна знайти положення

та час життя квазістаціонарних станів електрона, взаємодіючого з діркою. При цьому вважаємо, що важка дірка знаходиться в центрі наносистеми і час її життя значно переважає час життя електрона, зумовлений проникненням його крізь бар'єр.

Викладена теорія енергетичного спектра електрона у відкритих та закритих сферичних наносистемах, який знаходиться в кулонівському полі розміщеної в центрі наносистеми дірки, може бути застосована для наносистем, побудованих з таких матеріалів, в яких будуть виконуватись всі прийняті допущення. Ця теорія також може бути застосована для електрона, який знаходиться у закритій або відкритій наносистемі і взаємодіє з донорною домішкою, що знаходиться в центрі ядра наносистеми.

Зрозуміло, що в граничному випадку  $\epsilon \rightarrow \infty$ , кулонівська взаємодія зникає й енергетичний спектр, отриманий згідно із запропонованою теорією, повинен збігатись з енергетичним спектром електрона, одержаним для закритих сферичних наносистем у роботах [7-10], а для відкритих – [13,30]. У граничному випадку  $r_0 \rightarrow \infty$  електронний енергетичний спектр повинен мати воднеподібний характер. Такі перевірки виконано у наступному розділі.

### Результати числових розрахунків

Виконання числових розрахунків у загальному випадку довільного вигляду потенціалу тришарової сферичної наносистеми є складною задачею, яка вимагає послідовного підходу. В даній роботі, в рамках першого етапу розв'язання цієї задачі виконано розрахунки спектра електрона, який знаходиться в простій квантовій точці, в потенціальній ямі з безмежно високими стінками у кулонівському полі дірки. При розрахунках використовувались параметри напівпровідникового кристала HgS:  $m_e=0,036m_0, m_h=0,44m_0$  – ефективні маси електрона та дірки відповідно,  $m_0$  – маса вільного електрона,  $a=5,56 \text{ \AA}$  – постійна ґратки,  $\epsilon=18,2$  – діелектрична постійна масивного кристала HgS.

На рис.2 зображено залежності енергій основного та збуджених рівнів електрона від розміру квантової точки. Суцільні лінії – результат розрахунку за вище наведеною теорією з врахуванням взаємодії електрона з діркою. Штрихові лінії – без врахування кулонівської взаємодії. З рисунка видно, що збільшення розмірів квантової точки приводить до пониження всіх енергетичних рівнів. Причому, у відсутності кулонівської взаємодії енергетичний спектр, як відомо, асимптотично прямує до нуля.

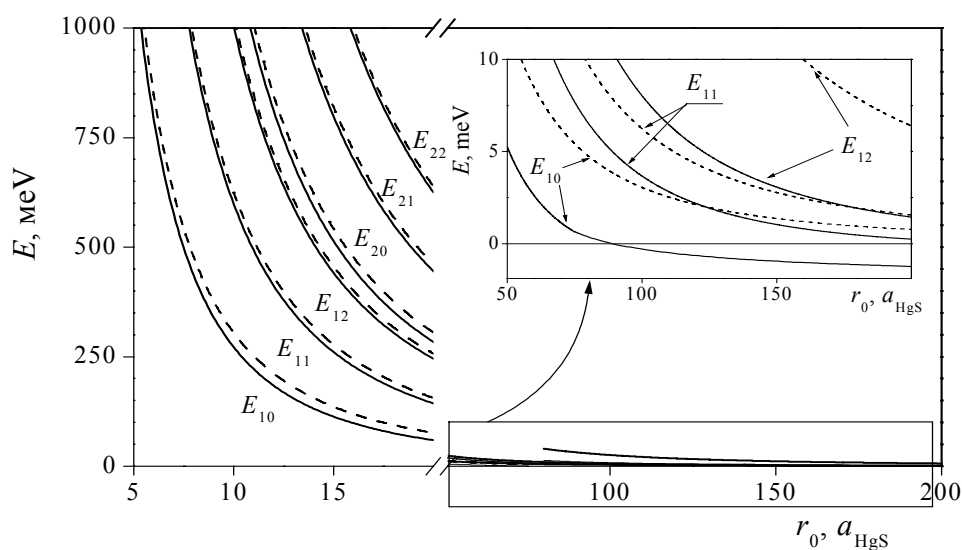


Рис.2. Залежність енергетичного спектра електрона від радіуса квантової точки. Суцільні лінії – електрон взаємодіє з діркою, штрихові лінії – без врахування кулонівської взаємодії.

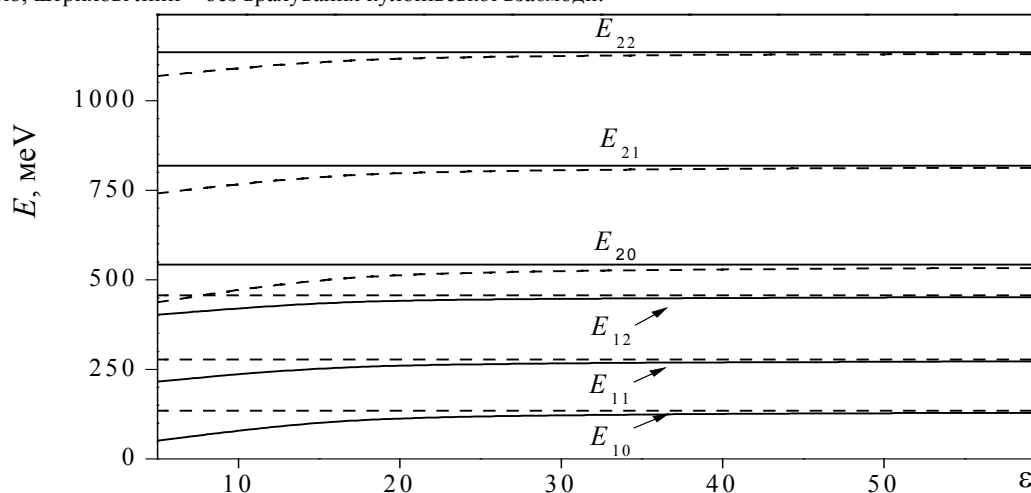


Рис.3. Залежність енергетичного спектра електрона від величини діелектричної проникності. Суцільні лінії – електрон взаємодіє з діркою, штрихові лінії – без врахування кулонівської взаємодії.

У випадку врахування взаємодії електрона з діркою, розміщеною в центрі квантової точки, кожний енергетичний рівень електрона досягає нульового значення енергії при кінцевих значеннях розміру квантової точки. Це зрозуміло з фізичних міркувань, оскільки у безмежному кристалі енергетичний спектр електрон-діркової пари має воднеподібний вигляд і знаходиться в області від'ємних енергій. З рисунка також видно, що величина поправки до енергії, пов'язаної з кулонівською взаємодією, найбільша для основного стану електрона і зменшується зі збільшенням орбітального квантового числа. Це пов'язано з тим, що у станах з більшим орбітальним квантовим числом електрон знаходиться далі від центра квантової точки і взаємодія з діркою стає слабшою.

Для перевірки впливу кулонівської взаємодії на енергетичний спектр електрона у сферичній безмежно глибокій квантовій ямі на рис.3 зображено залежність електронного енергетичного спектру від величини діелектричної проникності матеріалу квантової точки.

Збільшення величини діелектричної проникності приводить до зменшення кулонівського впливу дірки на спектр електрона. Цим пояснюється асимптотична поведінка наведена на рис.3 електронного енергетичного спектра.

#### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Yeh C-Y., Zhang S.B., Zunger A. Confinement, surface and chemisorption effects on the optical properties of Si quantum wires // Phys. Rev. B - 1994. - 50, №19. - P.14405-14415.

2. *Delerie C., Allan G., Lannoo M.* Theoretical aspects of the luminescence of porous silicon // *Phys. Rev. B* - 1993. - **48**, №15. - P.11024-11036.
3. *Read A.J., Needs R.J., Nash K.J., Canham L.T., Calcott P.D.J., Qteish A.* First-principles calculations of the electronic properties of silicon quantum wires // *Phys. Rev. Lett.* - 1992. - **69**, №8. - P.1232-1235.
4. *Buda F., Kohanoff J., Parrinello M.* Optical properties of porous silicon: A first-principles study // *Phys. Rev. B* - 1992. - **69**, №8. - P.1272-1275.
5. *A. Di Carlo.* Organic and Inorganic Nanostructures: An Atomistic Point of View // *Pys.stat.sol.(b)*. - 2001. - **232**, №1 - P.5-12.
6. *Schooss D., A. Mews, A. Eychmuller, H.Weller* Quantum dot quantum well CdS/HgS/CdS: theory and experiment // *Phys. Rev. B* - 1994. - II. - **49**, №24. - P.17072-17078.
7. *Ткач М.В., Головацький В.А., Войцехівська О.М., Мінькова М.Я.* Електронний спектр сферичної наногетеросистеми CdS/HgS/H<sub>2</sub>O // *УФЖ*. - 1998. - **43**, №5. - С.617-622.
8. *Головацький В.А.* Спектри квазічастинок в сферичних наноструктурах // *Науковий вісник Чернівецького університету. Фізика*. 1998. Випуск 40. - С.18-19.
9. *М. Ткач, В. Holovatsky, O. Voitsekhivska, M. Mikhalyova.* Spectrum and Interactions of Quasi-particles in complicated Spherical Nanoheterosystems  $\beta$ -CdS/HgS/ZnO/H<sub>2</sub>O // *Electrochemical Society Proceedings*. - 1998. - **25** - P.316-321.
10. *Ткач М.В., Головацький В.А., Войцехівська О.М., Міхальова М.Я., Фартушинський Р.Б.* Спектр електронів і дірок у сферичних наноструктурах // *Журнал фіз.досліджень*, 2000. - **4**, №3.- С.342-349.
11. *Головацький В.А.* Електронний і дірковий спектри періодичних сферичних наногетероструктур з внутрішньою потенціальною ямою // *Науковий вісник Чернівецького університету. Фізика*. 1998. Випуск 29. - С.26-31.
12. *Головацький В.А.* Електронний і дірковий спектри періодичних сферичних наногетероструктур з внутрішнім бар'єром // *Журнал фізичних досліджень*, 1998. - **2**, №4.- С.583-585.
13. *Ткач М.В., Головацький В.А.* Час життя електронних та діркових квазістаціонарних станів в сферичній наносистемі  $\beta$ -HgS/ $\beta$ -CdS/ $\beta$ -HgS // *УФЖ* - 2000. - **45**, №8. - С.972-975.
14. *Ткач Н.В., Головацький В.А.* Квазістаціонарні стани електронів і дірок в відкритій складній циліндричній квантовій проволочці // *ФТТ* - 2001. - **43**, №2. - С.350-356.
15. *Joachain C.J.* Quantum Collision Theory. North-Holland, Amsterdam, 1975. Sec. 4.5.
16. *Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М.* Рассеяния, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. - М.: Наука, 1971.
17. *Покутний С.И.* Спектр квантоворазмерного экситона в квазиульмерных структурах // *ФТТ*. - 1992. - **34**, №8. - С.2386-2391.
18. *Покутний С.И.* Квантово-размерный эффект Штарка в квазиульмерных полупроводниковых структурах // *ФТП*. - 2000. - **34**, №9. - С.1120-1124.
19. *Pokutnyi S.I.* Size quantization in quasi-zero-dimensional structures. Theory. // *Phys. Lett. A* - 1991. - **203**, №4. - P.388-394.
20. *Ефремов Н.А., Покутний С.И.* Энергетический спектр экситона в малой сферической полупроводниковой частице // *ФТТ*. - 1990. - **32**, №6. - С.1637-1643.
21. *Покутний С.И.* Экситон в квазиульмерных структурах // *ФТТ* - 1996. - **38**, №2. - С.512-522.
22. *Покутний С.И.* Межзонное поглощение света в квазиульмерных полупроводниковых системах // *ФТТ* - 1999. - **41**, №7. - С.1310-1313.
23. *Pokutnyi S.I.* Size quantization of excitons in quasi-zero-dimensional semiconductor structures // *Physics Letters A* - 1992. - **168**. - P.433-436.
24. *Ткач М.В., Головацький В.А., Войцехівська О.М.* Екситонний спектр у складній сферичній наногетеросистемі CdS/HgS/ZnS/H<sub>2</sub>O // *УФЖ* - 1999. - **44**, №3. - С.385-390.
25. *Ткач М., Holovatsky V., Voitsekhivska O., Mikhalyova M.* Spectra of quasiparticles and their interaction in complicated spherical nanoheterosystems // *Narrow Gap Semiconductor. Proceeding of the IX Intern. Conf. Institute of Physics, Humboldt University*. - Berlin, 2000, P.189-192.
26. *Marin J.L., Riera R., Cruz S.A.* Confinement of excitons in spherical quantum dots // *J.Phys.: Cond. Mat.* - 1998. - **10**. - P.1349-1361.
27. *Jeffrey A., Ryzhik I., Gradshteyn I., Geronimus Yu and Tseytlin M.* Table of Integrals, Series and Products. - New York: Academic, 1980.
28. *Arfken G.* Mathematical Methods for Physicists, 2<sup>nd</sup> edn. - New York: Academic, 1973.
29. *Abramowich A. and Stegun I.A.* Handbook of Mathematical Function with formulae, Graphs and Mathematical Tables. - Washington, DC: US GPO, 1964.