

ЕНЕРГІЯ ОДНОВАЛЕНТНОГО ТА ДНОВАЛЕНТНОГО ДОНОРА У СФЕРИЧНІЙ КВАНТОВІЙ ТОЧЦІ

Для сферичних наногетероструктур Si/SiO₂ та GaAs/AlAs у наближенні ефективної маси варіаційним способом обчислено енергію електронів одновалентної та двовалентної домішок як функцію радіуса квантової точки у випадку скінченної й нескінченної ям. Одержані результати порівняно з точними й показано, що вибрана варіаційна функція дає незначну похибку в обчисленнях. Показано, що при великих радіусах нанокристалів енергія прямує до значень, які відповідають значенням водневоподібної й гелієподібної домішки в об'ємному кристалі Si чи GaAs відповідно. При великих радіусах квантової точки основний енергетичний рівень двовалентного донора розташований нижче від одновалентного, а зменшення радіуса квантової точки веде до зростання енергії, яка для двовалентного донора зростає швидше, ніж для одновалентного. Визначено середні та найбільш ймовірні відстані електрона, які показали, що електрон із більшою ймовірністю знаходиться у квантовій точці.

For spherical nanoheterostructures of Si/SiO₂ and GaAs/AlAs in approaching of effective mass is calculated the energy of electrons of univalent and bivalent impurity as a function of the quantum dot radius by the variation method in the case of the finite and infinite wells. Receiving results were compared with exact results and showed, that the selected variation function gives a small error in the calculations. It is shown, that at the large radiuses of nanocrystals energy follows to the values which accord to the value of hydrogenic and heliumlike impurity in the by volume crystal of Si or GaAs accordingly. It is the got, that at large radiuses of the quantum dot the ground energy level of bivalent donor is subja-cent from univalent, and reduction of the quantum dot radius conduces energies to growth, which for the bivalent donor grows quick, than for univalent. Middle and most credible distances of electron, which showed that an electron with greater probability was in quantum dot, are certain.

Вступ

Упродовж останніх 20 років домішкові стани в різних обмежених системах, таких як квантові ями (КЯ), квантові нитки (КН) і квантові точки (КТ), є предметом інтенсивних досліджень у фундаментальних і прикладних роботах. Більшість наукових досліджень квантових наногетеросистем базується на побудові моделей із використанням макроскопічних величин, таких як ефективні маси, діелектричні проникності, для опису властивостей квазічастинок у низькорозмірних структурах. Це накладає певні обмеження при дослідженні наногетероструктур, однак реальні структури, що отримуються в більшості випадків, мають такі розміри, за яких можна користуватися макроскопічними величинами.

Значна частина дослідників [1-10] моделює взаємодію електрона з іоном домішки у вигляді кулонівської потенціальної енергії взаємодії зарядів в однорідному середовищі з діелектричною

проникністю ϵ . Для врахування потенціальної енергії донора на досить малих відстанях використовувався короткодіючий екранований потенціал [11]. У працях [12;13] досліджувалися домішки з використанням потенціалу нульового радіуса потужністю $\gamma=2\pi/\alpha$, де α – параметр, що визначається енергією зв'язку електронного локализованого стану на тому ж домішковому центрі в масивному напівпровіднику.

Праця [1] була однією з перших про зв'язані енергії водневоподібної домішки в нескінченній потенціальній ямі. З використанням методу ефективної маси варіаційним способом було обчислено енергію основного стану та енергію зв'язку донора й акцептора як функцію товщини плівки й координати домішки. Варіаційні хвильові функції вибирались на основі хвильових функцій частинки в потенціальній ямі з урахуванням варіаційного множника, що відповідає за домішку.

Властивості домішок у КТ описані у працях

[5-10], де, як і в більшості, використовувався метод ефективної маси для конкретних обчислень. На відміну від водневоподібних домішок у КЯ і КН, одновалентна домішка у сферичній КТ має точні розв'язки рівняння Шредінгера (РШ) з кулонівською потенціальною взаємодією між частинками. Автори [6-7] одержали точні розв'язки РШ для цієї системи. Потенціал, внаслідок існування розриву на краю енергетичної зони на поверхнях, задавався у вигляді прямокутної сферичної потенціальної ями. Розрахунок показує, що значення квантових рівнів електрона у сферичній КТ із ямою скінченної висоти відрізняються від відповідних рівнів при нескінченній ямі. Відмінність зростає, якщо розміри КТ зменшуються. Структура квантових рівнів донора аналогічна рівням електрона, який обмежений у сферичній КТ, якщо потенціал ями сильніший від потенціалу, який створює донор.

Грунтуючись на точно отриманих розв'язках, квантові рівні й енергії донора, розташованого не в центрі сферичної КТ, отримано з використанням варіаційного методу [9]. Одержано результати для основних і збуджених станів для донора у сферичній КТ, який розташований всередині або ззовні КТ. Результати демонструють розщеплення та зміну порядку квантових рівнів у залежності від радіуса КТ, розташування донора й висоти ями. Ще однією особливістю енергетичного спектра є перетин деяких енергетичних рівнів. Це означає, що простий кулонівський центр на певних відстанях від центру КТ може змінювати одноелектронний спектр КТ при її сталих розмірах. Причиною розщеплення є порушення симетрії системи, а зміна порядку рівнів виникає внаслідок порушення симетрії й конкурування кулонівської взаємодії й просторового обмеження.

Також залежність енергії системи від розташування домішки розглядалась у праці [12]. Показано, що енергії оптичних переходів залежать від розмірів КТ і розташування домішкового центру. Змінюючи розміри КТ і розташування домішки, можна налаштувати гетеросистему на ту чи іншу довжину хвилі випромінювання.

Тонка структура енергетичних рівнів водневоподібної домішки, що розташована в центрі сферичної квантової точки, обчислена в праці [10], використовуючи простий точний розв'язок для донора у сферичній КТ. Математично показано, що не існує радіусів КТ, за яких не можна знайти енергію зв'язаного стану домішки. Тонка енергетична структура домішки визначена теорією збурень. Поправки обчислено для доданків,

що виражають спін-орбітальну взаємодію, поправку для релятивістської кінетичної енергії й доданка Дарвіна.

У працях [6; 7; 10; 14] одержано точні розв'язки РШ для водневоподібної домішки у сферичній КТ, однак мало уваги приділено визначенню просторового розташування електрона в системі й обчисленню характерних відстаней.

У всіх перерахованих працях основна увага була приділена дослідженню одновалентної домішки. Однак у багатьох випадках домішки у КТ мають валентність, більшу за одиницю. Тому для подальших досліджень домішкових станів теоретичне вивчення залежності енергетичних рівнів двовалентного донора, як найпростішого з багатовалентних, від розмірів КТ буде корисним для інтерпретації експериментальних даних.

Мета даної роботи – визначення енергії основних станів одновалентних і двовалентних донорів у квантовій точці сферичної форми, а також обчислення середніх і найбільш імовірних відстаней електрона. Конкретні обчислення проведено для наногетеросистем Si/SiO₂ та GaAs/AlAs.

Постановка задачі та її розв'язок

Нехай у центрі сферичної квантової точки радіусом a знаходиться одновалентна домішка. Гамільтоніан такої системи в наближенні ефективної маси матиме вигляд

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m^*(r)} \nabla - \frac{Ze^2}{\epsilon r} + U(r) = \mathbf{H}_0(r) - \frac{Ze^2}{\epsilon r}, \quad (1)$$

$$\text{де } Z=1, \quad m^*(r) = \begin{cases} m_1^*, & r < a, \\ m_2^*, & r \geq a, \end{cases} \quad (2)$$

– ефективна маса електрона у відповідному кристалі; ϵ – середнє значення діелектричної проникності матеріалів. Потенціал у квантовій точці задається співвідношенням

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

Рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (1) розв'язано варіаційним способом. Для побудови пробної функції використано задачі про одну частинку (електрон) у сферичній потенціальній ямі. Основний стан заряду у сферичній потенціальній ямі з нескінченно високими стінками задається функцією

$$g_{1s}(r) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{2\pi a}} \frac{\sin(\pi r/a)}{r}, & r < a, \\ 0, & r \geq a, \end{cases} \quad (4)$$

а для моделі зі скінченним потенціалом на межі

поділу середовищ вона має вигляд

$$g_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \begin{cases} A_1 \frac{\sin(kr)}{r}, & r < a, \\ A_2 \frac{\exp(-\chi r)}{r}, & r \geq a, \end{cases} = \begin{cases} g_1(r), & r < a, \\ g_2(r), & r \geq a, \end{cases} \quad (5)$$

$$\text{де } k = \sqrt{\frac{2m_1^*}{\hbar^2} E_0}, \quad \chi = \sqrt{\frac{2m_2^*}{\hbar^2} (V - E_0)}, \quad (6)$$

E_0 – енергія основного стану частинки, а сталі A_1 та A_2 визначаються з граничних умов та умови нормування

$$\begin{aligned} g_1(r)|_{r=a} &= g_2(r)|_{r=a}, \\ \frac{1}{m_1^*} \frac{d}{dr} g_1(r) \Big|_{r=a} &= \frac{1}{m_2^*} \frac{d}{dr} g_2(r) \Big|_{r=a}, \quad (7) \\ \int d\vec{r} \cdot |g_{1s}(r)|^2 &= 1. \end{aligned}$$

Розглядаються квантові точки малих розмірів, для яких кінетична енергія частинки значно більша за потенціальну енергію. Тому варіаційну хвильову функцію для моделі нескінченного потенціалу на межі поділу вибрано так:

$$\Psi(r) = N_1 g_{1s}(r) \exp(-\delta r). \quad (8)$$

Експонента у (8) описує взаємодію електрона з позитивно зарядженим ядром домішки, δ – варіаційний параметр, N_1 – стала нормування. Для моделі скінченного потенціалу на межі поділу середовищ пробна функція запишеться у вигляді

$$\Psi(r) = \begin{cases} B_1 \cdot g_1(r) \exp(-\alpha r), & r < a, \\ B_2 \cdot g_2(r) \exp(-\beta r), & r \geq a. \end{cases} \quad (9)$$

Величини β , B_2 – сталі, які знайдено з граничних умов для функції $\Psi(r)$

$$\begin{aligned} B_1 (g_1(r) \exp(-\alpha r)) \Big|_{r=a} &= \\ &= B_2 (g_2(r) \exp(-\beta r)) \Big|_{r=a}, \\ \frac{B_1}{m_1^*} \frac{d}{dr} (g_1(r) \exp(-\alpha r)) \Big|_{r=a} &= \quad (10) \\ &= \frac{B_2}{m_2^*} \frac{d}{dr} (g_2(r) \exp(-\beta r)) \Big|_{r=a}. \end{aligned}$$

Одержано, що:

$$B_2 = B_1 \exp[a(\beta - \alpha)], \quad \beta = \frac{m_2^*}{m_1^*} \alpha. \quad (11)$$

Відповідно до варіаційного принципу Рітца, енергія системи визначається з мінімуму функціоналу

$$E(\alpha) = \frac{\langle \Psi | \mathbf{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (12)$$

Цю задачу можна розв'язати точно [6; 7; 10; 14]. Розв'язки радіального РШ мають вигляд

1) область $r < a$;

а) від'ємні енергії $E < 0$

$$R_{in}(\xi) = C_{in} e^{-\xi/2} \cdot \xi^L \cdot \Phi(L+1-\lambda, 2L+2, \xi), \quad (13)$$

$$\text{де } \xi = \alpha \cdot r, \quad \sigma^2 = -\frac{8m_1^* E}{\hbar^2} > 0, \quad \lambda = \frac{2m_1^* Z e^2}{\epsilon \hbar^2 \sigma}, \quad (14)$$

R – радіальна частина хвильової функції, L – орбітальне квантове число, C_{in} – константа, $\Phi(x,y,z)$ – вироджена гіпергеометрична функція;

б) додатні енергії $0 < E < V$

$$R_{in}(\xi) = C_{in} \xi^L \cdot \Phi_L(\eta, \xi), \quad (15)$$

$$\text{де } \xi = \sigma r, \quad \sigma^2 = -2m_2^* E / \hbar^2 < 0, \quad \eta = -\frac{m_2^* Z e^2}{\epsilon \hbar^2 \sigma}, \quad (16)$$

$$\Phi_L(\eta, \xi) = \sum_{n=L+1}^{\infty} A_n^L(\eta) \xi^{n-L-1}, \quad (17)$$

$$A_{L+1}^L = 1, \quad A_{L+2}^L = \frac{\eta}{L+1},$$

$$(n+L(n-L-1)) A_n^L = 2\eta A_{n-1}^L(\eta) - A_{n-2}^L(\eta); \quad (18)$$

2) область $r \geq a$

$$R_{out}(\xi) = C_{out} \sigma \cdot e^{-\xi/2} \xi^{\chi-1} \int_0^{\infty} e^{-t} t^{\chi+1} \left(1 + \frac{t}{\xi}\right)^{\chi+1} dt, \quad (19)$$

$$\xi = \sigma r, \quad \sigma^2 = 8m_2^* (V - E) / \hbar^2,$$

де

$$\chi = \frac{Z e^2}{2\epsilon \hbar} \sqrt{\frac{2m_2^*}{(V - E)}}. \quad (20)$$

З граничних умов, яким відповідають хвильові функції й потік густини ймовірності, одержано дисперсійне рівняння, з якого знаходиться енергетичний спектр електрона:

$$\frac{d}{dr} R_{in}(r) \Big|_{r=a} = \frac{d}{dr} R_{out}(r) \Big|_{r=a} = \frac{d}{dr} R_{in}(r) \Big|_{r=a} = \frac{d}{dr} R_{out}(r) \Big|_{r=a}. \quad (21)$$

Використовуючи точні розв'язки і викладений вище варіаційний розв'язок, у таблиці 1 подано енергії основного стану водневоподібної домішки, а також наведено похибку варіаційного методу при скінченному потенціалі на межі поділу середовищ. До таблиці 1 увійшли результати, які отримані при великих, проміжних і малих радіусах КТ для наногетероструктур Si/SiO₂ та GaAs/AlAs. З таблиці 1 видно, що при великих радіусах КТ похибка обчислення досить мала й

Таблиця 1. Точні E_{exact} , варіаційні E_{var} розв'язки та похибка варіаційного розв'язку η для водневоподібної домішки у сферичній КТ

GaAs/AlAs				Si/SiO ₂			
$a, \text{Å}$	E_{var}, eV	E_{exact}, eV	$\eta, \%$	$a, \text{Å}$	E_{var}, eV	E_{exact}, eV	$\eta, \%$
10	0,78321	0,78287	0,04343	10	0,31013	0,30634	1,23719
50	0,09156	0,09143	0,14219	30	-0,09852	-0,10164	3,06966
100	0,01565	0,01546	1,22898	50	-0,11809	-0,11977	1,40269
200	-0,00374	-0,00393	4,83461	60	-0,11967	0,12075	0,89441
300	-0,00619	-0,00634	2,36593	100	-0,12084	-0,12107	0,18997
500	-0,00683	-0,00687	0,58224	200	-0,12098	-0,12107	0,07434

прямує до нуля. Зменшення радіуса КТ призводить до зростання похибки, а при малих радіусах похибка знову зменшується й прямує до нуля. Найбільша похибка в обчисленнях складає не більше п'яти відсотків. Отже, дана пробна функція непогано описує основний стан одновалентного донора у сферичній наногетероструктурі і придатна для подальшого застосування в обчисленнях багатовалентних донорів.

Нехай у центрі сферичної КТ знаходиться двовалентна домішка. Гамільтоніан такої системи у наближенні ефективної маси матиме вигляд

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0(r_1) + \mathbf{H}_0(r_2) - \frac{Ze^2}{\epsilon r_1} - \frac{Ze^2}{\epsilon r_2} + \frac{e^2}{\epsilon r_{12}}, \quad (22)$$

де $\mathbf{H}(r_i)$ – гамільтоніан частинки у сферичній потенціальній ямі без домішки, $i=1,2$, $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, $Z=2$. Енергії й хвильові функції є розв'язками стаціонарного рівняння Шредінгера

$$\mathbf{H}\Psi = E\Psi. \quad (23)$$

Це рівняння не розв'язується точно для даної задачі, тому для визначення основного стану також використано варіаційний метод Рітца. З вигляду гамільтоніана очевидно, що достатньо розглянути хвильову функцію, яка залежить лише від r_1, r_2 . Для побудови пробної функції можна використати точні розв'язки [6; 7; 10; 14], ввівши варіаційний параметр. Однак його використання значно ускладнить процес обчислення. Оскільки функції (8) і (9) дають малу похибку обчислення, то для конструювання варіаційної функції використано розв'язки задач про частинку у сферичній потенціальній ямі зі скінченними та нескінченними стінками. Це набагато зменшить час обчислень і дасть прийнятні результати. Тому варіаційну хвильову функцію для моделі нескінченного потенціалу на межі поділу можна записати так:

$$\Psi(r_1, r_2) = N_2 g_{1s}(r_1) g_{1s}(r_2) \exp[-\delta(r_1 + r_2)]. \quad (24)$$

А для моделі скінченного потенціалу на межі поділу середовищ пробна функція запишеться у

вигляді

$$\Psi(r_1, r_2) = \left[\begin{matrix} B_1 \cdot g_1(r_1) \exp[-\alpha r_1], & r_1 < a, \\ B_2 \cdot g_2(r_1) \exp[-\beta r_1], & r_1 \geq a. \end{matrix} \right] \times \left[\begin{matrix} B_1 \cdot g_1(r_2) \exp[-\alpha r_2], & r_2 < a, \\ B_2 \cdot g_2(r_2) \exp[-\beta r_2], & r_2 \geq a. \end{matrix} \right] \quad (25)$$

Аналогічно, мінімізуючи функціонал типу (12) для даної системи, можна знайти енергію електронів.

Матричний елемент $\langle \Psi | \mathbf{H} | \Psi \rangle$ можна зобразити формулою

$$\langle \Psi | \mathbf{H} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \mathbf{H}_0(r_1) | \Psi \rangle + \langle \Psi | \mathbf{H}_0(r_2) | \Psi \rangle - \frac{Ze^2}{\epsilon} \left\langle \Psi \left| \frac{1}{r_1} \right| \Psi \right\rangle - \frac{Ze^2}{\epsilon} \left\langle \Psi \left| \frac{1}{r_2} \right| \Psi \right\rangle + \frac{e^2}{\epsilon} \left\langle \Psi \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \Psi \right\rangle. \quad (26)$$

Враховуючи тотожність електронів, $\langle \Psi | \mathbf{H} | \Psi \rangle$ зведеться до вигляду:

$$\langle \Psi | \mathbf{H} | \Psi \rangle = 2 \langle \Psi | \mathbf{H}_0(r_1) | \Psi \rangle - 2 \frac{Ze^2}{\epsilon} \left\langle \Psi \left| \frac{1}{r_1} \right| \Psi \right\rangle + \frac{e^2}{\epsilon} \left\langle \Psi \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \Psi \right\rangle. \quad (27)$$

Для обчислення третього доданка використано розклад

$$\frac{1}{r_{12}} = \sum_{l=0}^{\infty} \left[\frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} P_l(\cos \gamma) \right] = \sum_{l=0}^{\infty} \left[\frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} [Y_{l,m}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{l,m}(\theta_2, \varphi_2)] \right], \quad (28)$$

де γ – кут між \vec{r}_1 і \vec{r}_2 , $r_{<}$ – менша з довжин r_1 і r_2 , $r_{>}$ – більша з довжин r_1 і r_2 , $Y_{l,m}$ – сферична функція. Якщо підставити розклад (28) у (27), то після інтегрування за кутовими змінними можна отримати:

$$\left\langle \Psi \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \Psi \right\rangle = 16\pi^2 \int_0^{\eta} \left[\frac{1}{r_1} \int_0^{\eta} |\Psi|^2 r_2^2 dr_2 + \int_0^{\eta} |\Psi|^2 r_2 dr_2 \right] r_1^2 dr_1. \quad (29)$$

Підстановкою (29) у (27) одержано вираз для функціонала (12), мінімум якого визначає енергію системи.

Аналіз одержаних результатів

Використовуючи наведені вище формули, на ЕОМ було проведено розрахунок енергії основного стану одновалентної і двовалентної домішок у центрі сферичної квантової точки. Основні параметри кристалів, що утворюють гетеросистеми, подано в таблиці 2.

Обчислення проводилось для різних розмірів КТ, починаючи з 10 Å, бо при менших радіусах наближення ефективної маси перестає адекватно описувати наногетеросистеми.

На рис. 1 і рис. 2 наведені залежність енергії основного стану електрона для наногетероструктур Si/SiO₂ та GaAs/AlAs з одновалентною домішкою від радіуса КТ при скінченному та нескінченному потенціалах. Видно, що при великих радіусах КТ енергія домішки практично не залежить від радіуса КТ. У випадку Si/SiO₂ цей результат отримується при менших радіусах квантової точки, ніж для GaAs/AlAs. Причиною цього є різниця ефективних мас і глибина потенціальної ями, які в Si/SiO₂ більші, ніж у GaAs/AlAs. Також внаслідок відмінності цих параметрів отримуємо, що при великих радіусах для Si/SiO₂ розбіжність енергій при скінченному і нескінченному потенціалах є меншою, ніж для GaAs/AlAs. Плавна зміна енергії є наслідком того, що в цьому випадку потенціальна яма мало впливає на енергетичний рівень. Величина енергії, в основному, визначається кулонівською взаємодією. Отже, енергія системи прямує до енергії водневоподібної або гелієподібної домішки в об'ємному кристалі Si чи GaAs відповідно. Це пояснюється тим, що ймовірність перебування електронів у квантовій точці набагато більша, ніж у матриці. При зменшенні радіуса виникає суттєва відмінність між значеннями енергії, отриманими при використанні моделей скінченного та нескінченного потенціалів. Така поведінка зумовлена тим, що потенціал квантової ями починає відігравати більшу роль. Енергія системи зростає через просторове обмеження.

На рис. 3 та рис. 4 графічно наведені середні й найбільш ймовірні значення радіальної координати електрона в залежності від розмірів КТ. Видно, що при великих значеннях радіуса КТ характеристичні відстані електрона значно менші від радіуса КТ і майже від нього не залежать. Також у цьому діапазоні співвідношення між

Таблиця 2. Параметри наногетероструктур

	$m_1^*(m_0)$	$m_2^*(m_0)$	ϵ_1	ϵ_2	V, eV
Si/SiO ₂	0,250	0,50	11,7	2,4	3,200
GaAs/AlAs ₂	0,067	0,15	13,1	10,1	0,915

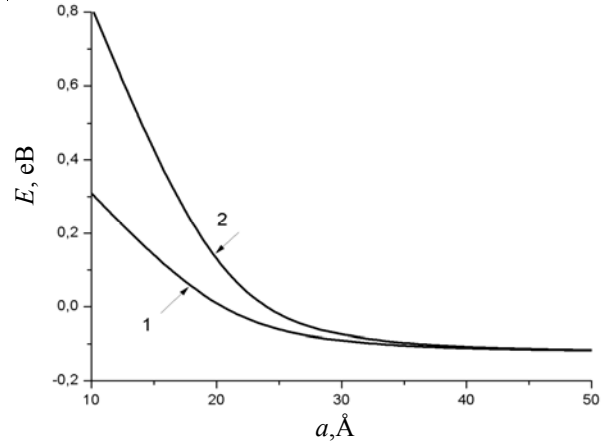


Рис. 1. Енергія одновалентного донора у сферичній КТ Si/SiO₂ при скінченному (1) та нескінченному (2) потенціалах на межі поділу середовищ

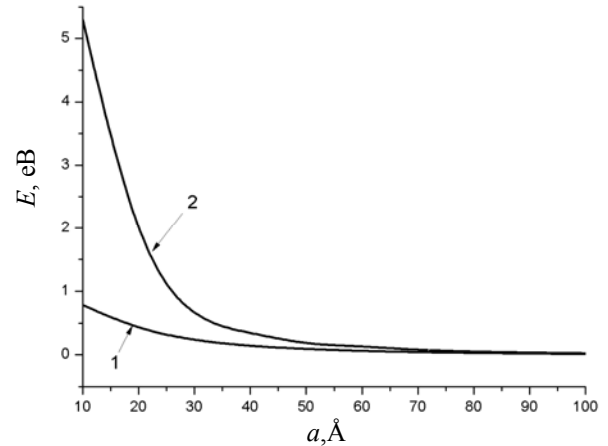


Рис. 2. Енергія одновалентного донора у сферичній КТ GaAs/AlAs при скінченному (1) та нескінченному (2) потенціалах на межі поділу середовищ

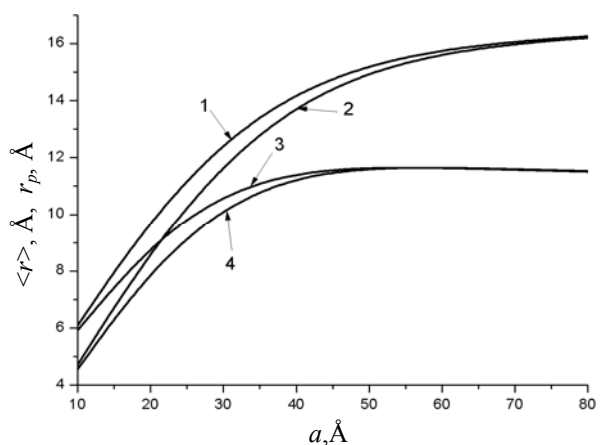


Рис. 3. Залежність середніх (1, 2) і найбільш ймовірних (3, 4) відстаней для одновалентного донора від радіуса КТ Si/SiO₂ при скінченному (1, 3) і нескінченному (2, 4) потенціалах на межі поділу середовищ

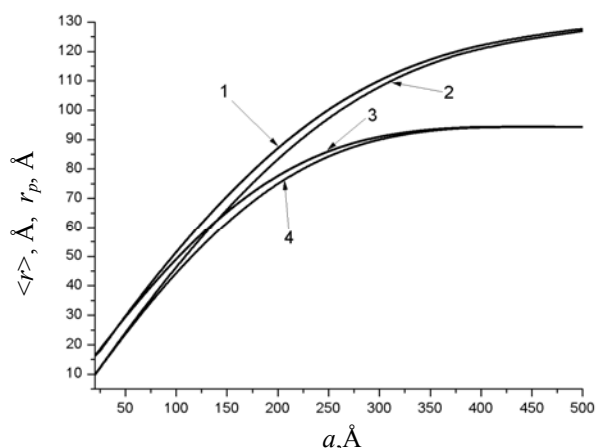


Рис. 4. Залежність середніх (1, 2) та найбільш імовірних (3, 4) відстаней для одновалентного донора від радіуса КТ GaAs/AlAs при скінченному (1, 3) та нескінченному (2, 4) потенціалах на межі поділу середовищ

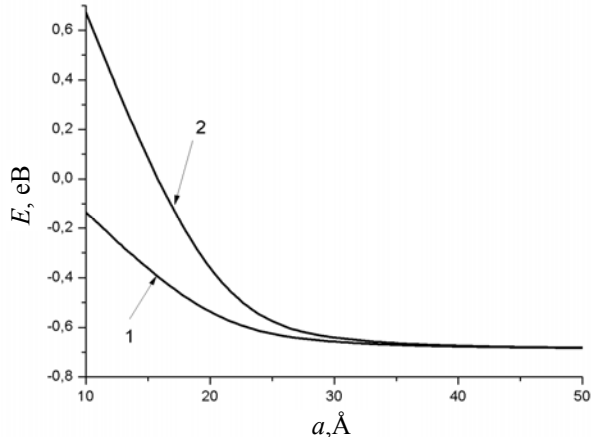


Рис. 5. Енергія двовалентного донора у сферичній КТ Si/SiO₂ при скінченному (1) і нескінченному (2) потенціалах на межі поділу середовищ

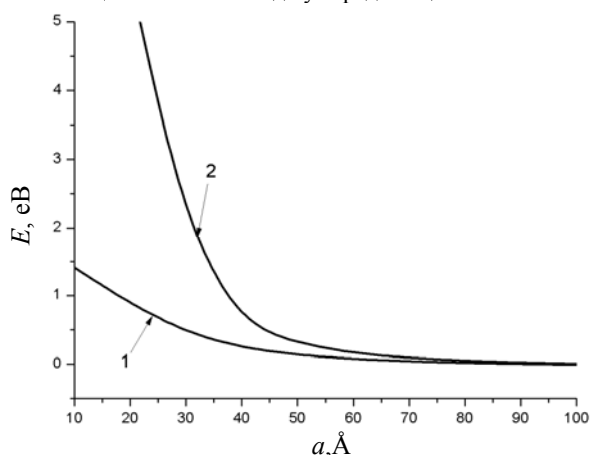


Рис. 6. Енергія двовалентного донора у сферичній КТ GaAs/AlAs при скінченному (1) і нескінченному (2) потенціалах на межі поділу середовищ найбільш ймовірною і середньою відстанню прямує до величини 1,5 як і водневоподібному атомі. При зменшенні радіуса КТ до 10 Å величина

характерних відстаней прямує до величини радіуса КТ. Зрозуміло, що середні й найбільш імовірні відстані при нескінченному потенціалі менші від відповідних відстаней при скінченному потенціалі, адже нескінченний потенціал набагато сильніше обмежує рух електрона.

Аналогічні обчислення проведено для двовалентного донора в центрі сферичних наногетероструктур. На рис. 5 і рис. 6 наведені графіки залежності енергії основного стану двовалентного донора у сферичних наногетероструктурах Si/SiO₂ і GaAs/AlAs.

Як і для одновалентного донора, енергія електронів при великих радіусах КТ змінюється монотонно, але по відношенню до одновалентного донора є меншою. Так само, середні й найбільш імовірні значення відстані електрона також для двовалентного донора менші від відповідних величин одновалентного. Це зумовлено тим, що заряд іона двовалентної домішки $Z=2$, а одновалентної – $Z=1$, тобто енергія притягання електрона для двовалентного донора більша від одновалентного. При зменшенні радіуса КТ енергія основного стану збільшується. Причому енергія двовалентної домішки зростає швидше, ніж одновалентної, бо для двовалентної домішки, крім просторового обмеження, існує ще енергія відштовхування електронів, яка є значною при малих радіусах КТ.

Зважаючи на те, що варіаційна функція для двовалентного донора вибрана у вигляді добутку однакових функцій, одна з яких залежить від r_1 , а друга – від r_2 , то середні й найбільш імовірні значення одного електрона будуть дорівнювати відповідним значенням другого електрона. На рис. 7 і рис. 8 наведені залежність характерних відстаней для одного з електронів від радіуса КТ. Видно, що при зростанні радіуса КТ характерні відстані електронів у КТ збільшуються, а при великих радіусах КТ від нього не залежать.

Отже, при визначенні енергії основного стану одновалентного і двовалентного донорів, що розташовані в центрі сферичної квантової точки, використано варіаційний метод обчислення, який дає задовільні результати при великих і малих радіусах КТ, а для проміжних радіусів – результати одержано з похибкою, що не перевищує п'яти відсотків. Розрахунки показали, що енергія електронів визначається двома конкуруючими факторами: кулонівською енергією взаємодії електронів з ядром домішки та просторовим обмеженням частинок. Кулонівська енергія між-

електронної взаємодії відіграє важливу роль при малих радіусах квантових точок. Основний енергетичний рівень двовалентного донора при великих радіусах КТ розташований нижче від одновалентного. Зменшення радіуса КТ веде до зростання енергії, яка для двовалентного донора зростає швидше, ніж для одновалентного, через додатну кулонівську потенціальну енергію відштовхування. Обчислення середніх і найбільш ймовірних відстаней показали, що для радіусів, за яких виконується наближення ефективної маси, електрони з більшою ймовірністю знаходяться всередині КТ.

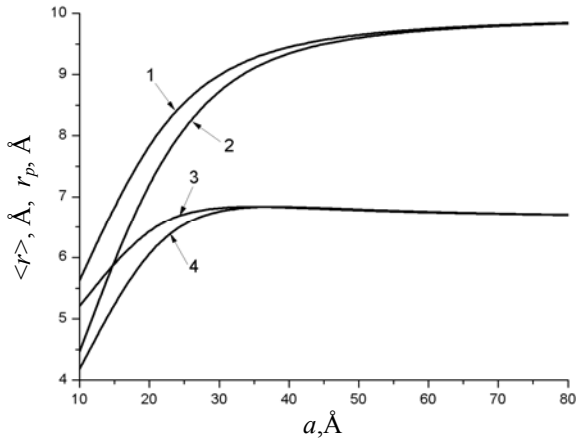


Рис. 7. Залежність середніх (1, 2) та найбільш ймовірних (3, 4) відстаней для двовалентного донора від радіуса КТ Si/SiO₂ при скінченному (1, 3) та нескінченному (2, 4) потенціалах на межі поділу середовищ

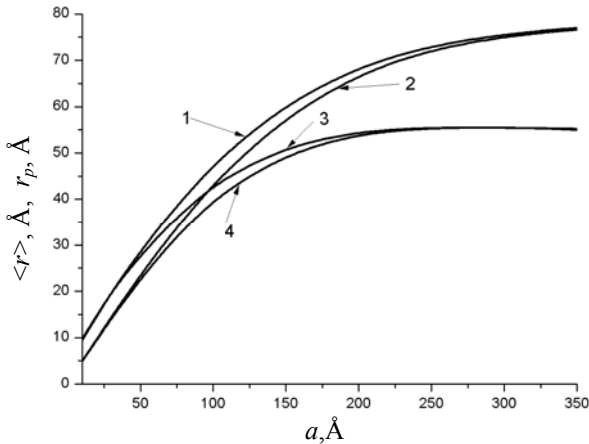


Рис. 8. Залежність середніх (1, 2) та найбільш ймовірних (3, 4) відстаней для двовалентного донора від радіуса КТ GaAs/AlAs при скінченному (1, 3) та нескінченному (2, 4) потенціалах на межі поділу середовищ

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Bastard G. Hydrogenic impurity states in quantum well: A simple mode // Phys. Rev. B. – 1981. – **24**. – P. 4714.
2. Bastard G., Mendez E.E., Chang L.L., Esaki L. Exiton binding energy in quantum wells // Phys. Rev. B. – 1982. – **26**. – P. 1974.
3. Bryant G.W. Hydrogenic impurity states in quantum-well wires // Phys. Rev. B. – 1984. – **29**, No.12. – P. 6632.
4. Bryant G.W. Hydrogenic impurity states in quantum-well wires: Shape effects // Phys. Rev. B. – 1985. – **31**, No.12. – P. 7812-7812.
5. Chu D.S., Hsiao C.M., Mei W.N. Hydrogenic impurity states in quantum dots and wires // Phys. Rev. B. – 1992. – **46**. – P. 3898.
6. Jia-Zin Zhu Exact solution of hydrogenic donor states in a spherically rectangular quantum well // Phys. Rev. B. – 1989. – **39**, No.12. – P. 8780.
7. Jia-Zin Zhu Confined electron and hydrogenic donor states in a spherical quantum dot of GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs // Phys. Rev. B. – 1990. – **41**, No.9. – P. 6001.
8. Riberio F.J., Latge A. Impurities in a quantum dot: A comparative study // Phys. Rev. B. – 1994. – **50**, No.7. – P. 7-10.
9. Jia-Zin Zhu Spectrum and binding energy of an off-center donor in a spherical quantum dot // Phys. Rev. B. – 1994. – V. **50**, No.7. – P. 4497.
10. Chun-Ching Yang, Li-Chi Liu, Shih-Hsin Chang Eigenstates and fine structure of a hydrogenic impurity in a spherical quantum dot. //Phys. Rev. B, II. – 1998. – **58**, No.4. P. 1954-1961.
11. Алешкін В.Я., Гавриленко Л.В. Расчет состояний мелких доноров в квантовых ямах в магнитном поле методом разложения по плоским волнам // ФТП. – 2005. – **39**, вып. 1.
12. Кривчик В.Д., Левашов А.В. Энергетический спектр и оптические свойства комплекса квантовая точка – примесный центр // ФТП. – 2002. – **36**, вып. 2. – С.216-220.
13. Кривчик В.Д., Зайцев Р.В., Евстифеев В.В. К теории фотоионизации глубоких примесных центров в параболической квантовой яме // ФТП. – 2000. – **34**, вып. 10. – С. 1244.
14. Ткач М.В., Головацький В.А., Березовський Я.М. // Фіз. і хім. тверд. тіла. – 2003. – **4**, вип. 2. – С. 213.