

ВПЛИВ НЕЦЕНТРАЛЬНОЇ ДОМІШКИ НА СТАНИ ЕЛЕКТРОНА У КВАНТОВІЙ ТОЧЦІ CdS/ZnS/CdS/SiO₂

Варіаційним методом у наближенні ефективних мас виконано теоретичне дослідження енергії основного стану електрона і розподілу густини ймовірності знаходження квазічастинки у наносистемі CdS/ZnS/CdS/SiO₂ з домішкою. Показано, що положення електрона та енергія зв'язку з домішкою у наносистемі визначається як параметрами квантової точки, так і положенням домішки.

Ключові слова: квантова точка, наносистема, енергія зв'язку, потенціальний бар'єр.

Вариационным методом в приближении эффективных масс проведено теоретическое исследование энергии основного состояния и распределения плотности вероятности нахождения квазичастицы в наносистеме CdS/ZnS/CdS/SiO₂ с примесью. Показано, что положение электрона и энергия связи с примесью в наносистеме определяется как параметрами квантовой точки, так и положением примеси.

Ключевые слова: квантовая точка, наносистема, энергия связи, потенциальный барьер.

The theoretical investigation of the electron ground state energy and quasiparticle density in CdS/ZnS/CdS/SiO₂ multilayered quantum dot with donor impurity is performed using variational method and effective mass approximation theory. It is shown that the electron location and binding energy with impurity are determined by the parameters of quantum dot and impurity position.

Keywords: quantum dot, nanosystems, binding energy, potential barrier.

Сучасні нанотехнології дозволяють створювати низку напівпровідникових приладів на основі наногетеросистем. Багатошарові наносистеми мають перспективу широкого застосування в електроніці як джерела білого світла [1], напівпровідникових міток і сенсорів для використання у медицині [2,3].

Наявність домішок суттєво впливає на властивості наноструктур, що, в свою чергу, позначаються на фізичних характеристиках приладів, створених на їх основі. Дослідження багатошарових наносистем з домішками проводиться вже більше десятиліття у рамках різних теоретичних моделей [4-8]. У праці [4] виконано теоретичні розрахунки енергії і хвильових функцій основного та збуджених станів електрона у багатошарових квантових точках GaAs/AlGaAs/GaAs/AlGaAs без домішки та з воднеподібною домішкою, розташованою у центрі. Різними авторами розраховано вплив центральної домішки на сили осциляторів квантових переходів [5, 6]. Для найпростіших сферич-

них наносистем виконано дослідження впливу нецентральної домішки на їх властивості [7, 8]. Проте вплив нецентральної і зовнішніх зарядів на розподіл густини ймовірності перебування квазічастинок у багатошарових наносистемах, що містять більше ніж одну квантову яму, залишається недостатньо вивченим. Саме такі системи мають перспективу застосування для створення новітніх джерел білого світла.

Нами виконано дослідження впливу положення нецентральної донорної домішки у багатошаровій квантовій точці CdS/ZnS/CdS/SiO₂ на розподіл густини ймовірності перебування електрона у наносистемі та енергію основного стану квазічастинки.

Методи розрахунків

Теоретичне дослідження виконано варіаційним методом у наближенні ефективних мас і прямокутних потенціальних бар'єрів. Розглядається багатошарова сферична наносистема, яка складається з ядра CdS (середовище «0») та двох сферичних оболонок

ZnS і CdS (середовище «1», «2»), поміщених у напівпровідникову матрицю SiO₂ (середовище «3»); товщина бар'єра Δ, ширина зовнішньої потенціальної ями ρ (рис.1). Домішка у системі розміщена на відстані r_{дом} від центра квантової точки.

Система координат вибрана наступним чином: початок системи координат поміщений у центр квантової точки, вісь Oz проходить через положення домішки.

Рівняння Шредінгера для електрона у сферичній квантовій точці з нецентральною домішкою має вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{\mu(\vec{r})} \vec{\nabla} \Psi_n(\vec{r}) + [U(\vec{r}) - \frac{e^2}{\varepsilon|\vec{r} - \vec{r}_{\text{дом}}|}] \Psi_n(\vec{r}) = E_n \Psi_n(\vec{r}). \quad (1)$$

Величина ε у загальному випадку є функцією координат квазічастинки, домішки та радіуса КТ і відіграє роль ефективної діелектричної проникності, що враховує особливості кулонівської взаємодії в неоднорідному діелектричному середовищі. Ефективні маси і потенціальна енергія електрона задаються співвідношеннями (2), (3):

$$\mu(\vec{r}) = \begin{cases} m_0, & r \leq r_0, r_1 < r \leq r_2, \\ m_1, & r_0 < r \leq r_1, \\ m_3, & r > r_2, \end{cases} \quad (2)$$

$$U(\vec{r}) = \begin{cases} 0, & r \leq r_0, r_1 < r \leq r_2, \\ V_1, & r_0 < r \leq r_1, \\ V_3, & r > r_2. \end{cases} \quad (3)$$

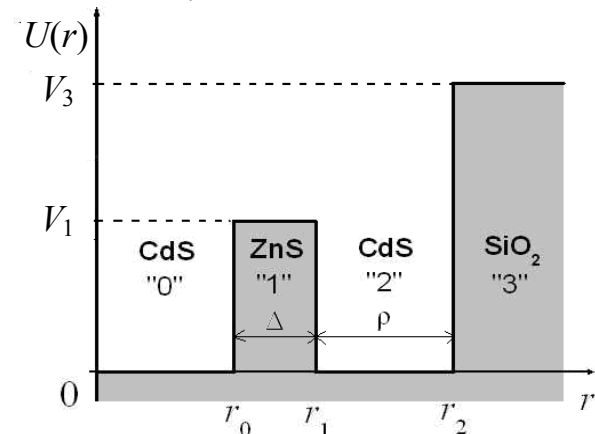


Рис.1. Потенціальна енергія електрона в багатшаровій КТ CdS/ZnS/CdS/SiO₂ без домішки.

Варіаційна хвильова функція основного стану електрона вибрана у вигляді добутку хвильової функції електрона у багатшаровій сферичній КТ без домішки Φ₁₀(r) і множника exp(-λ| $\vec{r} - \vec{r}_{\text{дом}}$ |), який відповідає за кулонівську взаємодію електрона з донорною домішкою (4), λ – варіаційний параметр.

$$\Psi_1(\vec{r}) = A \Phi_{10}(r) \exp(-\lambda|\vec{r} - \vec{r}_{\text{дом}}|). \quad (4)$$

Хвильові функції електрона в основному стані для КТ без домішки такі:

$$\Phi_{10}(r) = \begin{cases} A_{10}^{(0)} \frac{\sin(k_{10}r)}{k_{10}r}, & r \leq r_0 \\ A_{10}^{(1)} \frac{\exp(\chi_{10}r)}{\chi_{10}r} + B_{10}^{(1)} \frac{\exp(-\chi_{10}r)}{\chi_{10}r}, & r_0 < r \leq r_1 \\ A_{10}^{(2)} \frac{\sin(k_{10}r)}{k_{10}r} - B_{10}^{(2)} \frac{\cos(k_{10}r)}{k_{10}r}, & r_1 < r \leq r_2 \\ B_{10}^{(3)} \frac{\exp(-K_{10}r)}{K_{10}r}, & r > r_2, \end{cases} \quad (5)$$

де хвильові числа виражаються виразами:

$$k_{10} = \sqrt{\frac{2m_0 E_{10}^0}{\hbar}}, \quad \chi_{10} = \sqrt{\frac{2m_1 (V_1 - E_{10}^0)}{\hbar}},$$

$$K_{10} = \sqrt{\frac{2m_3 (V_3 - E_{10}^0)}{\hbar}}, \quad E_{10}^0 - \text{енергія основного стану електрона у квантовій точці CdS/ZnS/CdS/SiO}_2 \text{ без домішки.}$$

Невідомі коефіцієнти визначаються з умов неперервності хвильових функцій і потоків густини ймовірності перебування електрона у наносистемі на межах поділу середовищ та умови нормування.

Варіаційний параметр знаходиться з умови мінімуму функціоналу

$$E_1 = \min_{\lambda} \iiint \Psi_1^*(\vec{r})(T(\vec{r}) + U(\vec{r}))\Psi_1(\vec{r})d\vec{r}. \quad (6)$$

Енергія зв'язку електрона з домішкою визначається співвідношенням:

$$E^{3B} = E_{10}^0 - E_1, \quad (7)$$

E_1 – енергія основного стану електрона у квантовій точці CdS/ZnS/CdS/SiO₂ з домішкою.

Обговорення результатів розрахунків

Теоретично розраховані залежності енергії зв'язку електрона в основному стані з домішкою від положення донорної домішки наведені на рис. 2. Для порівняння енергію зв'язку обчислено для квантових точок з різними розмірами ядра: $r_0=5 a_{CdS}$ (суцільна крива), $r_0=8 a_{CdS}$ (штрихова крива), $r_0=11 a_{CdS}$ (пунктирна крива) (ширина зовнішньої потенціальної ями $\rho=10 a_{CdS}$) (рис. 2а) та різними ширинами зовнішньої потенціальної ями: $\rho=5 a_{CdS}$ (суцільна крива), $\rho=8 a_{CdS}$ (штрихова крива), $\rho=11 a_{CdS}$ (пунктирна крива) (радіус ядра $r_0=10 a_{CdS}$) (рис. 2б)). Товщина потенціального бар'єра $\Delta=3 a_{ZnS}$.

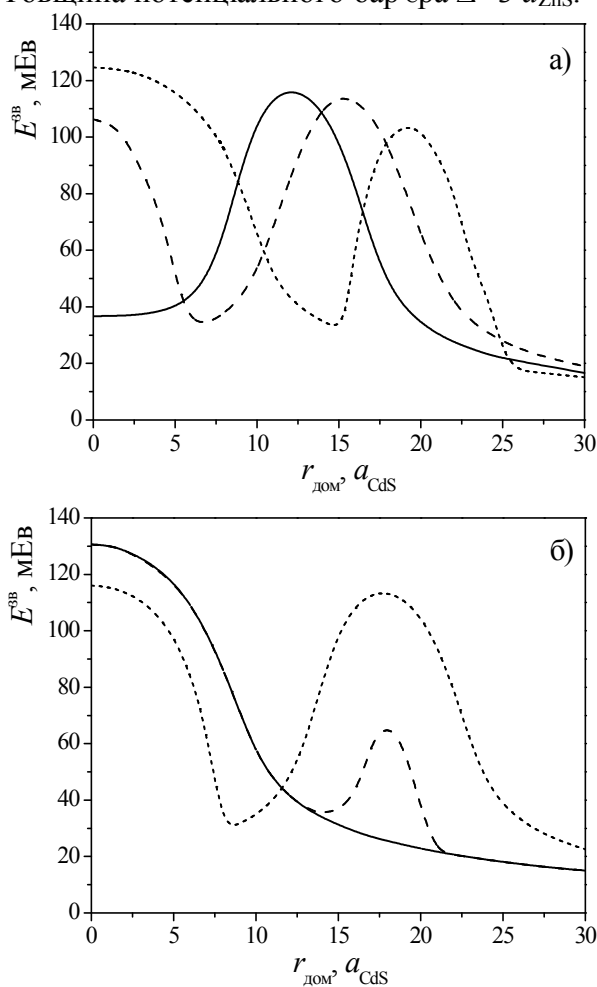


Рис. 2. Залежність енергії зв'язку електрона від положення домішки в КТ CdS/ZnS/CdS/SiO₂: з різним радіусом ядра (а) і з різною шириною зовнішньої потенціальної ями (б).

Поведінка залежностей енергії зв'язку від положення домішки узгоджується з розподілом густини ймовірності перебування електрона у наносистемі. На рис. 3 наведено розподіли густини ймовірності перебування електрона у СКТ для випадку зміщення домішки з центру на відстань $r_{дом}$: $r_0/2, r_0+\Delta/2, r_1+\rho/2, r_2+2 a_{SiO_2}$. Розміри систем, зображених на рис. 3 становлять відповідно: а) $r_0=5 a_{CdS}, \Delta=3 a_{ZnS}, \rho=10 a_{CdS}$, б) $r_0=10 a_{CdS}, \Delta=3 a_{ZnS}, \rho=5 a_{CdS}$; в) $r_0=11 a_{CdS}, \Delta=3 a_{ZnS}, \rho=10 a_{CdS}$.

Видно, що у випадку малого радіуса ядра, навіть центральна домішка не в змозі втягнути електрон у ядро – енергія зв'язку електрона з домішкою, розміщеною в центрі КТ, мала (рис 3а)). Аналогічно, при малих розмірах зовнішньої ями, залежність енергії зв'язку електрона від положення домішки має один максимум у випадку центральної домішки. Електрон, внаслідок розмірного квантування, локалізується у ядрі (рис. 3б)). Якщо потенціальні ями близькі за розмірами, то електрон може знаходитися в одній, або в іншій ямі, в залежності від положення домішки (рис. 3в)). З рис. 2 видно, що енергія зв'язку електрона з домішкою набуває максимального значення у випадку, коли домішка знаходиться у більшій за розмірами ямі.

Висновки

Отримано залежність енергії зв'язку електрона в основному стані від положення домішки в багатошаровій квантовій точці CdS/ZnS/CdS/SiO₂. Побудовано розподіли густини ймовірності перебування електрона у КТ при різних положеннях домішки.

Дослідження показують, що у багатошаровій сферичній наносистемі домішка суттєво впливає як на розподіл густини ймовірності розташування електрона в КТ, так і на енергію квазічастинки.

З отриманих в ході роботи залежностей видно, що її вплив максимальний у випадку, коли домішка розташована у більшій за розмірами потенціальної ямі квантової системи.

Наявність домішки у потенціальних ямах багат шарових наносистем буде суттєво впливати на енергії і інтенсивності кванто-

вих переходів, що в свою чергу відобразиться на фізичних властивостях напівпровідникових приладів, створених на їх основі.

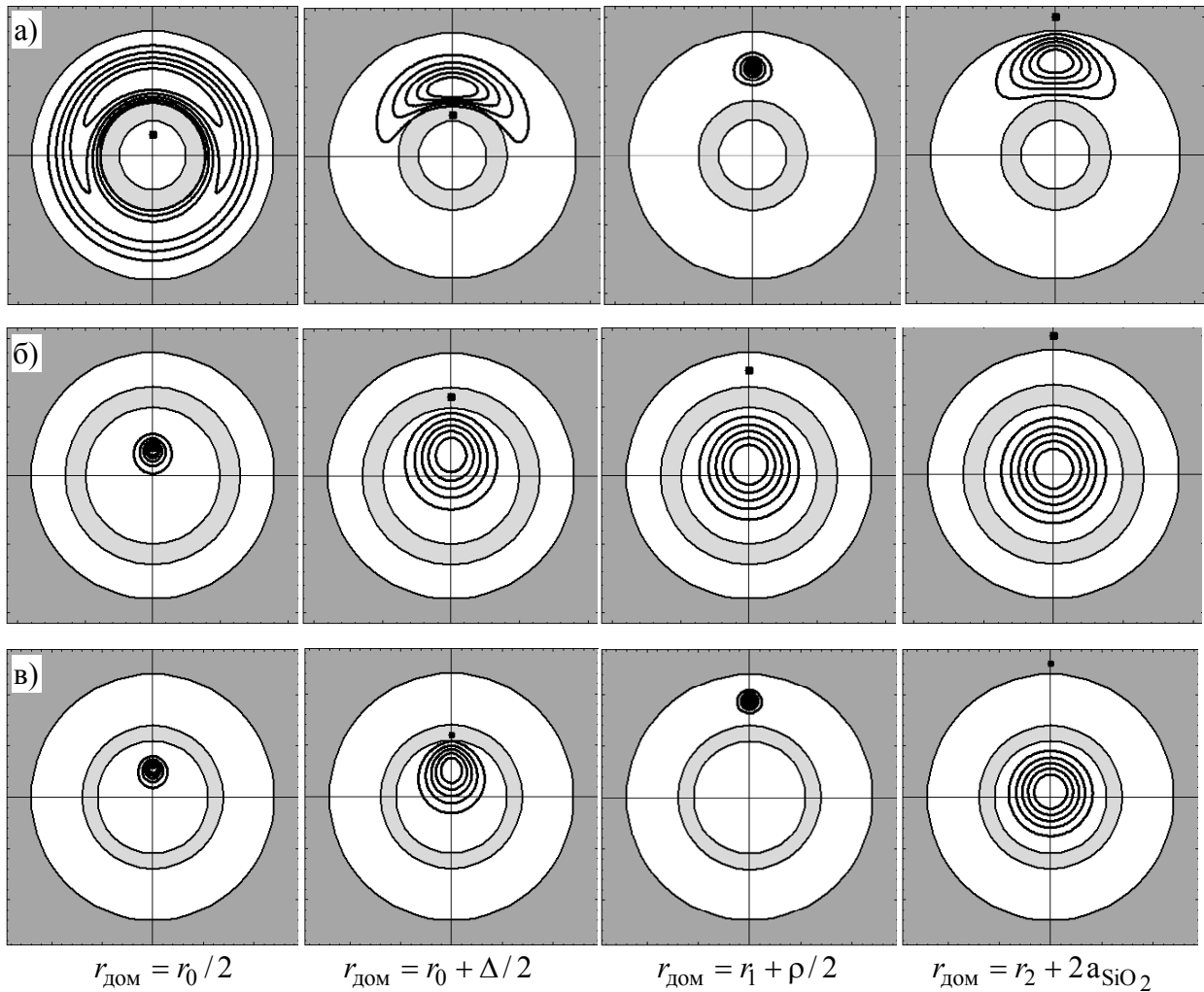


Рис. 3. Розподіл густини ймовірності перебування електрона у наносистемі.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Nizamoglu S., Demir H.V. Resonant nonradiative energy transfer in CdSe/ZnS core/shell nanocrystal solids enhances hybrid white light emitting diodes // *Optics Express*. – 2008. – **16** (18). – P. 13961-13968.
2. Martin-Palma R.J., Manso M., Torres-Costa V. Optical biosensors based on semiconductor nanostructures // *Sensors*. – 2009. – **9** (7). – P. 5149-5172.
3. Frasco M.F., Chaniotakis N. Semiconductor quantum dots in chemical sensors and biosensors // *Sensors*. – 2009. – **9**, (9). – P. 7266-7276.
4. Tas H., Sahin M. The electron properties of core/shell/well/shell spherical quantum dot with and without a hydrogenic impurity // *Journal of Applied Physics*. – 2012. – **111** (8). – P. 083702-1-083702-8.
5. Holovatsky V., Makhanets O., Voitsekhivska O. Oscillator strengths of electron quantum transitions in spherical nano-systems with donor impurity in the center // *Physica E*. – 2009. – **41** (8). – P.1522-1526.
6. Tas H., Sahin M. The inter-sublevel properties of a spherical quantum dot-quantum well with and without a hydrogenic impurity // *Journal of Applied Physics*. – 2012. – **112** (5). – P. 053717-1-053717-9.
7. Головацький В.А., Франків І.Б. Енергії та хвильові функції електрона у сферичній квантовій точці CdS/SiO₂ з однією та двома воднеподібними домішками // *Журнал фізичних досліджень*. – 2012. – **16** (1/2). – С. 1706-1-1706-9.
8. Бойчук В.І., Лешко Р.Я., Білинський І.В., Турянська Л.М. Лінійний та нелінійний коефіцієнти поглинання світла сферичною квантовою точкою з нецентральною домішкою // *Фізика і хімія твердого тіла*. – 2012. – **13** (2). – С. 319-324.