

В.І. Бойчук, Р.Я. Лешко, І.В. Білинський, Л.М. Турянська

Лінійний та нелінійний коефіцієнти поглинання світла сферичною квантовою точкою з нецентральною домішкою

*Кафедра теоретичної фізики Дрогобицького державного педагогічного університету ім. І. Франка,
вул. Стрийська 3, м. Дрогобич, 82100, e-mail: leshkoroman@mail.ru*

Проведено обчислення енергетичного спектру донорної домішки у сферичній квантовій точці як функцію її розміру. Досліджено залежність енергетичних рівнів електрона від розташування домішки у наносистемі. Проаналізовано вплив положення домішки на дипольний момент та силу осцилятора міжрівневих переходів. Визначено лінійний та нелінійний коефіцієнти поглинання світла, зумовлений міжрівневими переходами електрона.

Ключові слова: домішка, коефіцієнт поглинання світла.

Стаття постуила до редакції 01.12.2011; прийнята до друку 15.03.2012.

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 адаптувати 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 - 7, 9 - 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 коефіцієнт поглинання 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, 16]. 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 нецентральною домішкою, малодосліджені.

Зважаючи на це все, метою поданої роботи є:

- визначення енергетичного спектру нецентральною донорною домішкою;
- обчислення лінійних та нелінійних оптичних параметрів (дипольний момент, сила осцилятора міжрівневих переходів, коефіцієнт поглинання світла) КТ з нецентральною домішкою.

І. Методика розрахунку

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:

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

де m^* — ефективна маса електрона у КТ,

$$W(\mathbf{r}, \mathbf{D}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 e |\mathbf{r} - \mathbf{D}|} \quad (2)$$

— кулонівська потенціальна енергія взаємодії електрона з іоном домішки, e_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:

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

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 нескінченним потенціалом на межі поділу середовищ можна виразити за допомогою сферичної функції

Бесселя першого роду:

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

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

$$\Psi_1(\mathbf{r}) = B_1 y_{1s}^0(r) \exp\left[-a_1 \sqrt{r^2 + D^2 - 2rD \cos q}\right]. \quad (5)$$

Експонента у (5) описує взаємодію електрона з позитивно зарядженим ядром домішки, a_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:

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

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:

$$\begin{aligned} \Psi_2(\mathbf{r}) &= B_2 (\cos q - D/c) y_{1p}(\mathbf{r}) \exp\left[-a_2 \sqrt{r^2 + D^2 - 2rD \cos q}\right] = \\ &= (\cos q - D/c) F(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (7)$$

Тут $y_{1p}(\mathbf{r})$ — нормована хвильова функція 1p-стану електрона у нескінченно глибокій сферично-симетричній прямокутній потенціальній ямі без домішки, a_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

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

Коефіцієнт c згідно (8) залежить лише від варіаційного параметра a_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 a_2 . Тому мінімізацією функціонала 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:

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

а силу осцилятора записати так:

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

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

$$a(w, I) = a^{(lin)}(w) + a^{(nonlin)}(w, I), \quad (11)$$

де перший доданок описує лінійний коефіцієнт поглинання світла:

$$a^{(lin)}(w) = w \sqrt{\frac{m_0}{e_0 e}} \frac{s |M_{1,2}|^2 \hbar \Gamma_{1,2}}{(E_2 - E_1 - \hbar w)^2 + (\hbar \Gamma_{1,2})^2}, \quad (12)$$

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

$$a^{(nonlin)}(w) = -w \sqrt{\frac{m_0}{ee_0}} \left(\frac{I}{2e_0 \sqrt{ec}} \right) \frac{s |M_{1,2}|^2 \hbar \Gamma_{1,2}}{(E_2 - E_1 - \hbar w)^2 + (\hbar \Gamma_{1,2})^2} \times \left(4 |M_{1,2}|^2 - \frac{(M_{2,2} - M_{1,1})^2 (3(E_2 - E_1)^2 - 4(E_2 - E_1) \hbar w + \hbar^2 w^2 - \hbar^2 \Gamma_{1,2}^2)}{(E_2 - E_1)^2 + \hbar^2 \Gamma_{1,2}^2} \right) \quad (13)$$

де e_0 — електрична стала, m_0 — магнітна стала, c — швидкість світла, $\hbar \Gamma_{1,2}$ — енергія релаксації, що зумовлена електрон-фононною взаємодією та іншими факторами розсіяння. Вважаємо, що КТ знаходиться при низьких температурах, поверхня її є ідеальною, тому параметр $\hbar \Gamma$ можна оцінити як ширину енергетичних рівнів, величина яких зумовлена розсіюванням на акустичних фононах. Якщо розглянути температуру системи $T = 20K$, то $\hbar \Gamma : 1.7 meV$. Густина зарядів у КТ S вибрано на основі припущення, що у КТ може знаходитись лише 1 електрон (домішковий електрон), тому $s = 3 / (4\pi a^3)$.

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

II. Результати розрахунку та їх обговорення

Усі обчислення проведено для КТ CdS , параметри якої такі: $m^* = 0.2 m_e$, $\epsilon = 5.5$, $a = 40 \text{ \AA}$. Результати залежності енергії домішки від її розташування у КТ подано на рис.1. На графіку подано енергію основного стану (крива 1) та першого збудженого (крива 2). Як видно з рисунка, зміщення домішки до краю КТ веде до монотонного зростання енергії основного стану системи та до немонотонного зростання енергії першого збудженого. Причиною

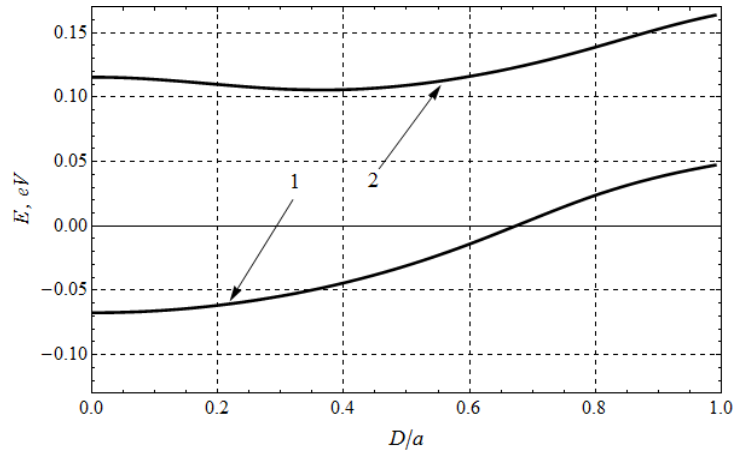


Рис. 1. Енергія основного та першого збудженого станів домішки у КТ. Радіус КТ $a = 40 \text{ \AA}$.

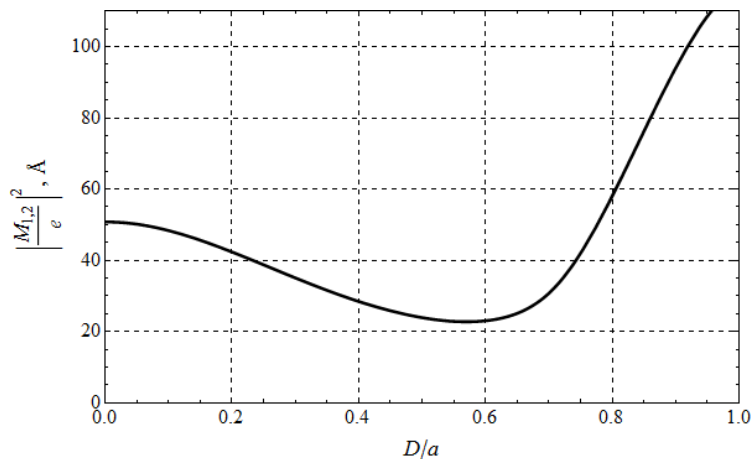


Рис. 2. Квадрат матричного елемента дипольного моменту міжрівневих переходів. Радіус КТ $a = 40 \text{ \AA}$.

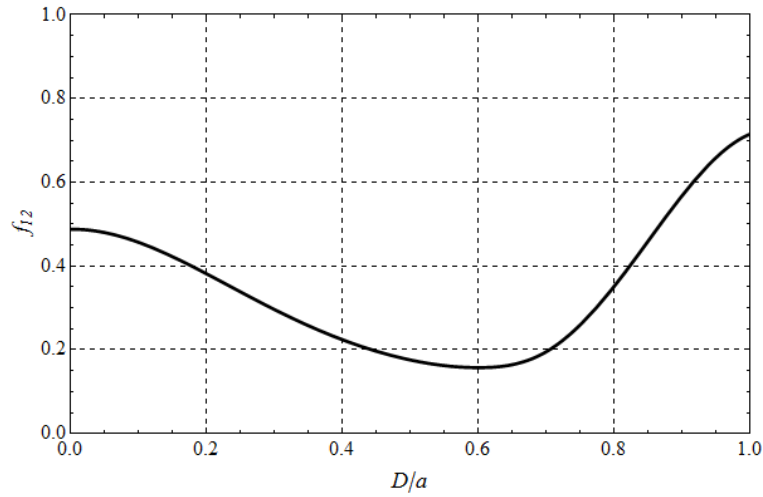


Рис. 3. Сила осцилятора переходу електрона з основного у перший збуджений стан . Радіус КТ $a = 40 \text{ \AA}$.

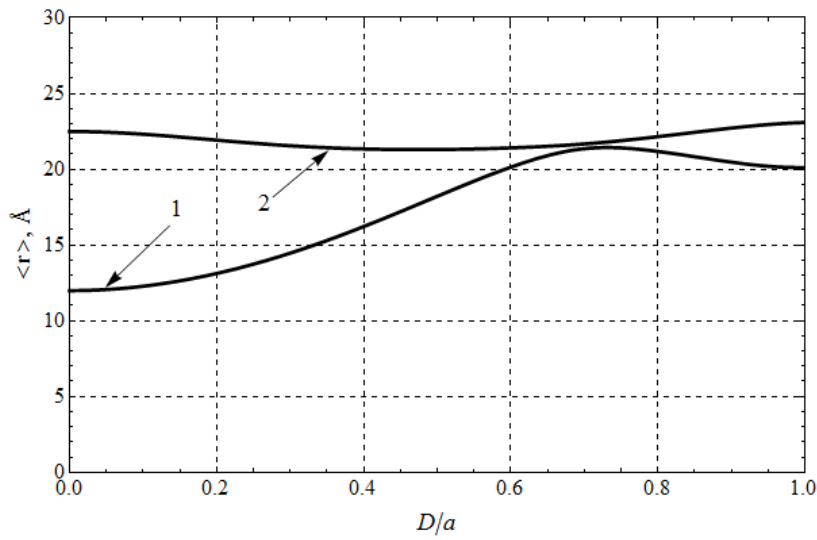


Рис. 4. Середня відстань для домішкового електрона 1 — середня відстань основного стану, 2 — першого збудженого. Радіус КТ $a=40 \text{ \AA}$.

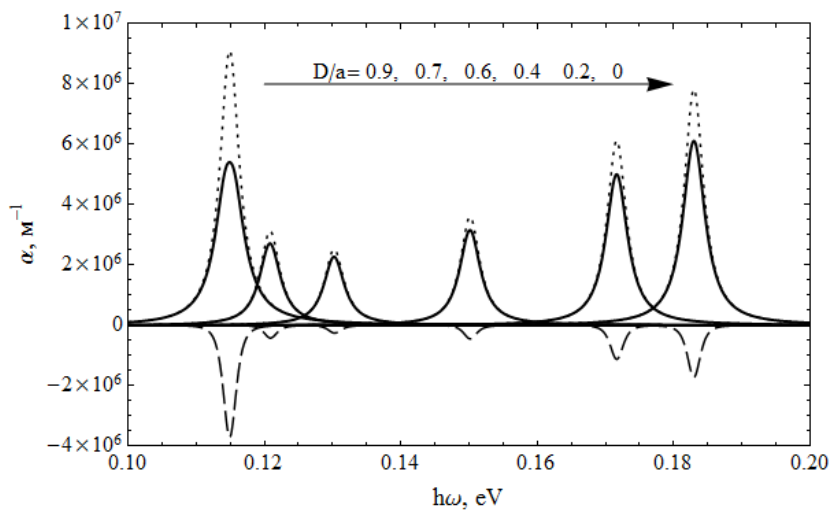


Рис. 5. Лінійний (пунктирна крива), нелінійний (штрихова крива) та сумарний коефіцієнти поглинання світла для різних значень розташування домішки у КТ. Радіус КТ $a = 40 \text{ \AA}$.

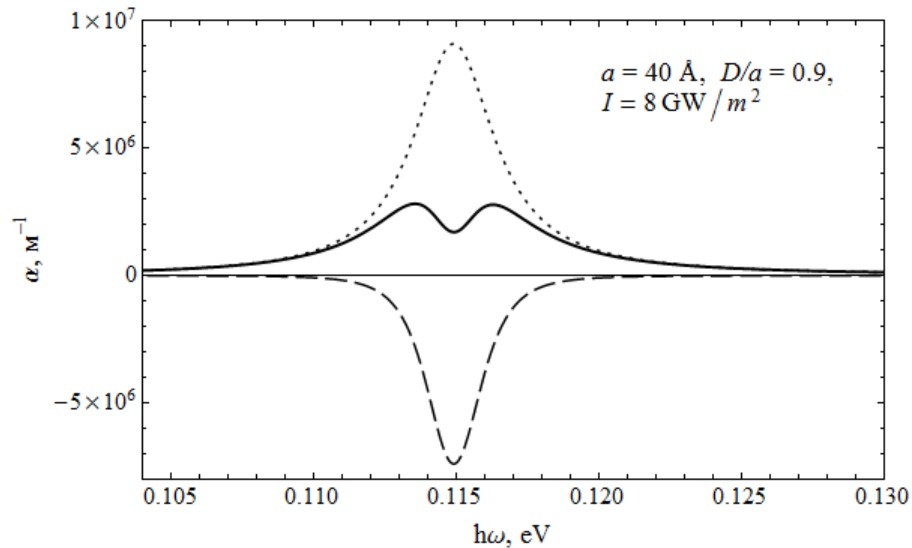


Рис. 6. Лінійний (пунктирна крива), нелінійний (штрихова крива) та сумарний коефіцієнти поглинання світла при досить значній інтенсивності світла. Радіус КТ $a = 40 \text{ \AA}$.

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. 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 центрально водневоподібну домішку у сферичній КТ. Середня відстань електрона в основному стані є найближчою до середньої відстані електрона у збудженому стані при $D/a \approx 0.7$ (рис. 4). Саме тому поблизу цієї точки спостерігається мінімум у залежності $|M_{1,2}/e|^2$ та

$f_{1,2}$ від D/a . Такий характер залежності відобразиться на висоті смуг у лінійному коефіцієнті поглинання світла (рис. 5, пунктирна крива), який має вигляд Лоренцової кривої, площа під якою пропорційна силі осцилятора. На рис. 5 також подано нелінійний третього порядку (штрихова крива) і сумарний коефіцієнт поглинання світла (суцільна крива). 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 смуг поглинання у низькоенергетичну область. Причиною такої залежності є зменшення відстані між енергетичними рівнями основного та першого збудженого станів. Якщо ж збільшувати

інтенсивність світла, то висота смуг нелінійного коефіцієнта поглинання зростатиме, а в сумарному коефіцієнті поглинання один пік поглинання перейде у два, що видно на рис. 6.

Висновки

Отже, у цій роботі проведено теоретичне дослідження сферичної КТ з нецентрально 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 оптичний коефіцієнти поглинання світла, яке зумовлене міжрівневими переходами електрона у КТ з нецентральною домішкою і показати, що зміщення домішки від центра КТ веде до зміщення смуг поглинання у низькоенергетичну область.

Бойчук В.І. - доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри теоретичної фізики;
Лешко Р.Я. - кандидат фізико-математичних наук, викладач кафедри теоретичної фізики Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка;
Білинський І.В. - кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри теоретичної фізики;
Турянська Л.М. - аспірант Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка.

- [1] D. Bimberg, M. Grundmann, N.N. Ledentsov, *Quantum Dot Heterostructures*. Wiley, Chichester, 328 p. (1999).
- [2] C.-C. Yang, L.-C. Liu, and S.-H. Chang. Eigenstates and fine structure of a hydrogenic impurity in a spherical quantum dot // *Phys. Rev. B*, **58**(4), pp. 1954-1961 (1998).
- [3] М.В. Ткач, В.А. Головацький, Я.М. Березовский. Спектр і хвильові функції водневоподібної домішки, розміщеної в центрі квантової точки // *Фіз. і хім. тверд. тіла.*, **4**(2), сс. 213-220 (2003).
- [4] S.S. Li, J.B. Xia. Electronic states of a hydrogenic donor impurity in semiconductor nano-structures // *Phys. Lett. A*, **366**(1–2), pp. 120-123 (2007).
- [5] V.I. Boichuk, I.V. Bilynskyi, R.Ya. Leshko. The effect of polarization charges on energy of univalent and bivalent donors in a spherical quantum dot // *Condensed Matter Physics*, **11**(4), pp. 653-661 (2008).
- [6] M.R.K. Vahdani, G. Rezaei. Linear and nonlinear optical properties of a hydrogenic donor in lens-shaped quantum dots // *Physics Letters A*, **373**(34), pp. 3079-3084 (2009).
- [7] D. Nasria, N. Sekkal. General properties of confined hydrogenic impurities in spherical quantum dots // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, **42**(9), pp. 2258-2263 (2010).
- [8] W. Xie. Optical properties of an off-center hydrogenic impurity in a spherical quantum dot with Gaussian potential // *Superlattices and Microstructures*, **48**(2), pp. 239-247 (2010).
- [9] W. Xie. Impurity effects on optical property of a spherical quantum dot in the presence of an electric field // *Physica B: Condensed Matter*, **405**(16), pp. 3436-3440 (2010).
- [10] V.I. Boichuk, I.V. Bilynskyi, R.Ya. Leshko, L.M. Turyanska. 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*, **44**(2), pp. 476-482 (2011).
- [11] Shu-Shen Li, Jian-Bai Xia. Electronic states of a hydrogenic donor impurity in semiconductor nano-structures // *Phys. Lett. A*, **366**(1–2), pp. 120-123 (2007).
- [12] E. Sadeghi, A. Avazpour. Binding energy of an off-center donor impurity in ellipsoidal quantum dot with parabolic confinement potential // *Physica B: Condensed Matter*, **406**(2), pp. 241-244 (2011).
- [13] G. Rezaei, M.R.K. Vahdani, and B. Vaseghi. Nonlinear optical properties of a hydrogenic impurity in an ellipsoidal finite potential quantum dot // *Current Applied Physics*, **11**(2), pp. 176-181 (2011).
- [14] Y. Yakar, B. Cakir, A. Ozmen. Calculation of linear and nonlinear optical absorption coefficients of a spherical quantum dot with parabolic potential // *Optics Communications*, **283**(9), pp. 1795-1800 (2010).
- [15] Wei Wu, Dibyendu Dey and Hooman Mohseni. A voltage tunable quantum dot photodetector for terahertz detection // *J. Phys. D*, **43**, p. 155101(6 pages) (2010).
- [16] G. Rezaei, M.R.K. Vahdani, M. Barati. Polaron Effects on the Intersubband Optical Absorption Coefficient and Refractive Index Changes of an Infinite Confining Potential Quantum Box // *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics*, **3**(2), pp. 159–162 (2008).

V.I. Boichuk, R.Ya. Leshko, I.V. Bilynskyi, L.M. Turyanska

Linear and Nonlinear Absorption Coefficient of a Spherical Quantum Dot with the off-Central Impurity

*Department of theoretical physics
Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University,
Stryiska street, 3, Drhohobych, Lviv region, 82100, E-mail: leshkoroman@mail.ru*

The calculation of the energy spectrum of the donor impurity in the spherical quantum dot was conducted as the function of the quantum dot size. The dependence of the electron energy levels on the impurity position in the quantum dot had been studied. The effect of the impurity position in the quantum dot on the dipole momentum and oscillator strength of the interlevel transitions had been analyzed. The linear and nonlinear light absorption coefficient which is caused of the interlevel transition had been defined. The linear and nonlinear light absorption coefficient, which is caused of the interlevel transition, had been defined.

Key words: impurity, light absorption coefficient.