

ДИСКРЕТНІ ТА КВАЗІСТАЦІОНАРНІ СТАНИ ВОДНЕВОПОДІБНОЇ ДОМІШКИ У ВІДКРИТІЙ СФЕРИЧНІЙ НАНОГЕТЕРОСИСТЕМІ

В. І. Бойчук, І. В. Білінський, Р. Я. Лешко, Л. Я. Вороняк
*Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,
Інститут фізики, математики та інформатики, кафедра теоретичної фізики,
вул. Стрийська, 3, Дрогобич, 82100*
(Отримано 4 листопада 2008 р.; в остаточному вигляді — 26 жовтня 2009 р.)

Для сферичної наногетероструктури Si/SiO₂/Si в наближенні ефективної маси на основі точних розв'язків рівнянь Пуассона та Шредингера визначено дискретні та квазістаціонарні стани водневоподібної домішки для різних радіусів квантової точки. Знайдено і проаналізовано залежності енергії домішки й середньої тривалості життя електрона у квазістаціонарних станах від зовнішнього та внутрішнього радіусів квантової точки.

Ключові слова: водневоподібна домішка, двошарова квантова точка, дискретні та квазістаціонарні стани.

PACS number(s): 71.55.-i, 73.21.La, 79.60.Jv

I. ВСТУП

Досі значна частина теоретичних та експериментальних досліджень присвячена домішковим станам у різних обмежених системах, зокрема у квантових точках (КТ). Протягом останніх 20 років у багатьох працях добре теоретично описано одношарові сферичні КТ. У [1–5] проведено перші теоретичні дослідження домішкових станів у КТ, отримано точні розв'язки рівняння Шредингера з кулонівською потенціальною взаємодією між частинками.

Сучасні експериментальні технології та методи, наприклад метод йонного заміщення, дають змогу створювати багатошарові сферично-симетричні наногетеросистеми [6–8]. Залежно від того, які матеріали створюють наногетероструктуру, багатошарова КТ може бути відділена від матриці або потенціальною ямою, або бар'єром, тобто гетеросистема може бути відкритою або закритою. У роботі [9] для сферичної наногетеросистеми β -HgS/ β -CdS/ β -HgS за допомогою матриці розсіювання теоретично знайдено та проаналізовано положення квазістаціонарних енергетичних рівнів і тривалість життя носіїв на цих рівнях залежно від розмірів шарів гетеросистеми.

Перші спроби вивчення домішки в багатошаровій КТ зроблено у праці [10], де варіаційним методом визначено основний стан донора. А в роботі [11] на основі точного розв'язку рівняння Шредингера встановлено спектр водневоподібного донора двошарової КТ залежно від внутрішнього та повного радіусів КТ і величин потенціальної ями та потенціального бар'єра. Також визначено енергію зв'язку донора. Однак у працях [1–4, 10–11] для спрощення обчислень використовували наближення, що діелектричні проникності середовищ однакові й дорівнюють середньому значенню. Такий підхід має очевидні недоліки. Особливо для гетеросистем, у яких є велика відмінність між

діелектричними проникностями. Урахування діелектричних проникностей КТ і матриці, а також поляризаційних зарядів, що виникають на межах гетеросистеми, може значно змінювати величину ефективної потенціальної ями [12].

Зважаючи на це все, у запропонованій статті на основі точного розв'язку рівняння Пуассона для двошарової КТ з позитивно зарядженим йоном домішки в її центрі визначено потенціальну енергію взаємодії йона домішки з електроном, ураховуючи різні значення діелектричних проникностей різних шарів КТ і матриці. Використовуючи знайдену потенціальну енергію, точно розв'язано рівняння Шредингера для дискретного спектра водневоподібної домішки, визначено квазістаціонарні стани і тривалість життя електрона в цих станах. Установлено вплив величини внутрішнього й зовнішнього радіусів КТ на енергетичний спектр електрона. Конкретні обчислення проведено для відкритої сферичної наногетеросистеми Si/SiO₂/Si.

II. ТЕОРІЯ

A. Потенціал позитивно зарядженої частинки у центрі двошарової сферичної КТ

Розглядану тришарову сферичну наногетеросистему (двошарову КТ), модель якої зображено на рис.1. У центрі такої системи є позитивний точковий заряд q . Радіуси внутрішнього та зовнішнього шарів КТ — a та b , тому $a \leq b$. Внутрішня область (область 1) має діелектричну проникність ϵ_1 , зовнішній шар КТ (область 2) — діелектричну проникність ϵ_2 , а діелектрична проникність матриці (область 3) дорівнює ϵ_3 .

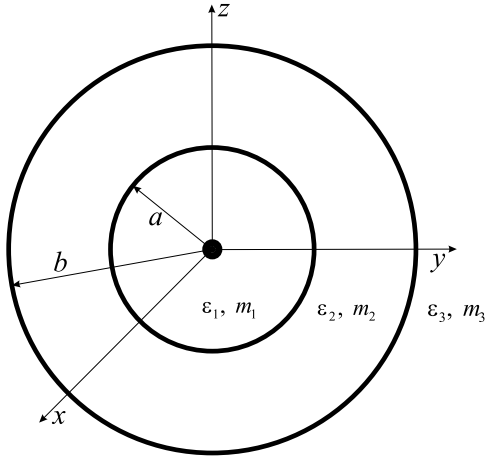


Рис. 1. Двошарова сферична КТ.

Для того, щоб визначити потенціал, створений зарядом q , необхідно розв'язати рівняння Пуассона у трьох областях, яке внаслідок сферичної симетрії задачі набуде вигляду:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dr^2}\Phi_1(r) + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\Phi_1(r) &= -\frac{4\pi q}{\varepsilon_1}\delta(r), & r \leq a, \\ \frac{d^2}{dr^2}\Phi_2(r) + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\Phi_2(r) &= 0, & a < r \leq b, \\ \frac{d^2}{dr^2}\Phi_3(r) + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\Phi_3(r) &= 0, & r > b. \end{aligned} \quad (1)$$

Відповідні розв'язки цих рівнянь запишемо за допомогою формул:

$$\begin{aligned} \Phi_1(r) &= A_1 + \frac{A_2}{r}, & r \leq a, \\ \Phi_2(r) &= B_1 + \frac{B_2}{r}, & a < r \leq b, \\ \Phi_3(r) &= C_1 + \frac{C_2}{r}, & r > b. \end{aligned} \quad (2)$$

Невідомі коефіцієнти визначено з умов рівності потенціалу нулеві на нескінченності, неперервності потенціалу та нормального складника вектора індукції електричного поля на межах середовищ і теореми Гаусса:

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{q(a\varepsilon_1(\varepsilon_2 - \varepsilon_3) + b\varepsilon_3(\varepsilon_1 - \varepsilon_2))}{\varepsilon_1\varepsilon_2\varepsilon_3ab}, & A_2 &= \frac{q}{\varepsilon_1}, & C_1 &= 0, \\ B_1 &= \frac{q(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)}{\varepsilon_2\varepsilon_3b}, & B_2 &= \frac{q}{\varepsilon_2}, & C_2 &= \frac{q}{\varepsilon_3}. \end{aligned} \quad (3)$$

Визначивши всі невідомі коефіцієнти, знайдемо потенціал, який створює заряд q у центрі КТ.

В. Водневоподібна домішка в центрі двошарової сферичної КТ

Нехай позитивно заряджений йон водневоподібної домішки із зарядом $q = e$ перебуває в центрі відкритої сферичної наногетероструктури. Потенціальна енергія, що зумовлена розривом зон, матиме вигляд:

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r \leq a, \\ 0, & b \geq r > a, \\ -U_0, & r > b, \end{cases} \quad U_0 > 0. \quad (4)$$

Потенціальну енергію взаємодії електрона з йоном домішки, який вважаємо позитивним точковим зарядом, одержуємо на основі формул (2)–(3):

$$V(r) = e^2 \begin{cases} -\frac{1}{\varepsilon_1 r} - \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 a} - \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_3}{\varepsilon_3 \varepsilon_2 b}, & r \geq a, \\ -\frac{1}{\varepsilon_2 r} - \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_3}{\varepsilon_3 \varepsilon_2 b}, & b \geq r > a, \\ -\frac{1}{\varepsilon_3 r}, & r > b. \end{cases} \quad (5)$$

Повна потенціальна енергія електрона у двошаровій КТ дорівнює:

$$\Pi(r) = V(r) + U(r) = \begin{cases} \frac{-e^2}{\varepsilon_1 r} - U_1^*(a, b), & r \geq a, \\ \frac{-e^2}{\varepsilon_2 r} - U_2^*(a), & b \geq r > a, \\ \frac{-e^2}{\varepsilon_3 r} - U_0, & r > b, \end{cases} \quad (6)$$

де введено ефективні потенціальні ями:

$$U_1^*(a, b) = \frac{e^2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 a} + \frac{e^2(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)}{\varepsilon_3 \varepsilon_2 b} + U_0, \quad (7)$$

$$U_2^*(a) = \frac{e^2(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)}{\varepsilon_3 \varepsilon_2 b}. \quad (8)$$

Із (7) і (8) видно, що ефективні потенціальні ями залежать від розмірів гетеросистеми та діелектричних проникностей. На рис. 2 схематично зображено

потенціальну енергію електрона $\Pi = \Pi(r)$ у двошаровій КТ.

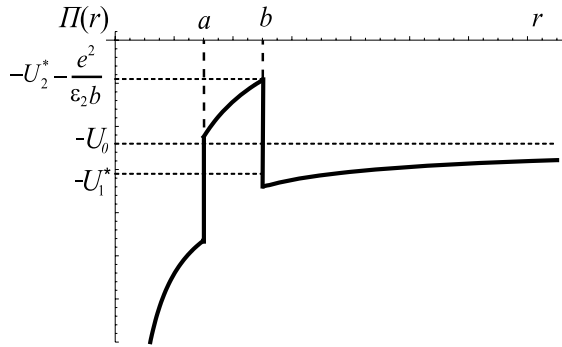


Рис. 2. Вигляд потенціальної ями.

Так само, як і в [9–14], тут використано наближення ефективної маси. Тоді оператор повної енергії нанотеросистеми запишемо так:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m^*(r)} \nabla + \Pi(r), \quad (9)$$

де

$$m^*(r) = \begin{cases} m_1^*, & r \leq a, \\ m_2^*, & b \geq r > a, \\ m_3^*, & r > b. \end{cases} \quad (10)$$

З аналізу потенціалу (6) видно, що при $E < U_0$ існує дискретний спектр. Якщо $E > -U_2^*(b) - e^2/\varepsilon_2 b$, то енергетичний спектр стає неперервним, а при $-U_0 < E < -U_2^*(b) - e^2/\varepsilon_2 b$ існують квазістаціонарні стани.

1. Дискретний спектр домішки

Рівняння Шредингера з гамільтоніаном (9) для дискретного спектра розв'язується точно. Враховуючи сферичну симетрію задачі, хвильову функцію, що є розв'язком рівняння Шредингера, можна подати як добуток радіального та кутового складників:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (11)$$

де $Y_l^m(\theta, \varphi)$ — сферичні функції. Зручно записати радіальне рівняння Шредингера для 3-х областей зміни координати r .

Нехай $r \leq a$, тоді радіальне рівняння Шредингера матиме вигляд:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_1^* r^2} - \frac{e^2}{\varepsilon_1 r} - U_1^*(a, b) - E \right\} R_1(r) = 0. \quad (12)$$

У цій області можуть існувати стани з енергією як меншою, так і більшою за $-U_1^*(a, b)$. Тому рівняння

(12) розглядаємо для цих двох діапазонів енергій. Якщо $E < -U_1^*(a, b)$, то варто ввести безрозмірні величини:

$$\xi = \alpha_{1a} r, \quad \alpha_{1a}^2 = -8m_1^*(E + U_1^*(a, b))/\hbar^2, \\ \lambda_1 = 2m_1^* e^2 / (\varepsilon_1 \hbar^2 \alpha_{1a}), \quad R_1(\xi) = \rho_1(\xi) / \xi.$$

Після нескладних перетворень рівняння (12) зведеться до такого:

$$\frac{\partial^2 \rho_1(\xi)}{\partial \xi^2} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{\lambda_1}{\xi} - \frac{l(l+1)}{\xi^2} \right] \rho_1(\xi) = 0. \quad (13)$$

Отримали рівняння Віттекера, яке має два лінійно незалежні розв'язки. З умови скінченності хвильової функції на початку координат визначено явний вигляд розв'язку рівняння (13):

$$\rho_1(\xi) = C_{11} e^{-\xi/2} \xi^{l+1} M(l+1 - \lambda_1, 2l+2, \xi), \quad (14)$$

де $M(a, b, x)$ — гіпергеометрична функція 1-го роду [16].

Розгляньмо іншу область енергій: $-U_1^*(a, b) < E < -U_0$. Увівши такі позначення:

$$\xi = \alpha_{1b} r, \quad \alpha_{1b}^2 = 2m_1^*(E + U_1^*(a, b))/\hbar^2, \\ \beta_1 = -m_1^* e^2 / (\varepsilon_1 \hbar^2 \alpha_{1b}), \quad R_1(\xi) = \rho_1(\xi) / \xi,$$

рівняння (12) можна звести до вигляду:

$$\frac{\partial^2 \rho_1(\xi)}{\partial \xi^2} + \left[1 - \frac{2\beta_1}{\xi} - \frac{l(l+1)}{\xi^2} \right] \rho_1(\xi) = 0. \quad (15)$$

Одержали рівняння Кулона. Його розв'язок, що задовольняє умови скінченності хвильової функції, має вигляд:

$$\rho_1(\xi) = C_{11} \frac{2^l e^{-\frac{\pi\beta_1}{2}} |\Gamma(l+1 + i\beta_1)|}{\Gamma(2l+2)} e^{-i\xi} \xi^{l+1} \\ \times M(l+1 - i\beta_1, 2l+2, 2i\xi), \quad (16)$$

де $\Gamma(z)$ — гамма-функція Ейлера [16].

Нехай $a < r \leq b$. Вводячи безрозмірні величини:

$$\xi = \alpha_2 r, \quad \alpha_2^2 = -8m_2^*(E + U_2^*(b))/\hbar^2, \\ \lambda_2 = 2m_2^* e^2 / (\varepsilon_2 \hbar^2 \alpha_2), \quad R_2(\xi) = \rho_2(\xi) / \xi,$$

можна отримати рівняння Віттекера. Його розв'язком є дві лінійно незалежні функції, які входять у загальний розв'язок:

$$\rho_2(\xi) = C_{21} e^{-\xi/2} \xi^{l+1} M(l+1 - \lambda_2, 2l+2, \xi) \\ + C_{22} e^{-\xi/2} \xi^{-l} U(-l - \lambda_2, -2l, \xi), \quad (17)$$

де $U(a, b, x)$ — вироджена гіпергеометрична функція 2-го роду [16].

Якщо $r > b$, то безрозмірні величини зручно ввести так:

$$\xi = \alpha_3 r, \quad \alpha_3^2 = -8m_3^*(E + U_0)/\hbar^2, \\ \lambda_3 = 2m_3^* e^2 / (\varepsilon_3 \hbar^2 \alpha_3), \quad R_3(\xi) = \rho_3(\xi) / \xi.$$

Радіальне рівняння Шредингера перетвориться знову в рівняння Віттекера. Хвильову функцію, що задовольняє умови скінченності, можна записати в інтегральній формі[16]:

$$\rho_3(\xi) = C_{31} \frac{e^{-\xi/2} \xi^{-l}}{\Gamma(-l - \lambda_3)} \times \int_0^{\infty} dt e^{-\xi t} t^{-l - \lambda_3 - 1} (1+t)^{-l + \lambda_3 - 1} \quad (18)$$

Отже, у параграфі знайдено розв'язки рівняння Шредингера для дискретного спектра домішки.

2. Квазістаціонарні стани домішки

Задачу про проходження електрона через бар'єр розв'язано, використовуючи умову “випромінювання”, згідно з якою електрон рухається лише в напрямку від КТ (проходить бар'єр із середини). При обчисленнях необхідно брати в зовнішньому середовищі (матриці) лише падаючі хвилі. У такій постановці задачі немає стаціонарних станів. Умова “випромінювання” з усього спектра вибирає деякі стани, які називаються квазістаціонарними [15].

Нехай протікання частинок відбувалося протягом тривалого часу, так що значна їхня частина перебуває ззовні бар'єра. Тоді хвильову функцію, яка є розв'язком нестационарного рівняння Шредингера, можна записати у вигляді:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp\left(-i \frac{\tilde{E}}{\hbar} t\right), \quad (19)$$

де величина \tilde{E} є комплексною й виражається через енергію (E) квазістаціонарного рівня:

$$\tilde{E} = E - \frac{i\hbar}{2} \delta. \quad (20)$$

Тоді ймовірність перебування частинки всередині бар'єра ($r \leq a$) визначатиметься формулою[15]:

$$W(t) = \int_{r \leq a} d\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\delta t} \int_{r \leq a} d\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = W(0) e^{-\delta t}. \quad (21)$$

Величина δ є сталою розпаду, а $\Delta E = \hbar\delta/2$ — шириною квазістаціонарного рівня. Тоді $\tau = 1/\delta$ є середньою тривалістю життя частинки у стані $\psi(\mathbf{r}, 0) = \psi(\mathbf{r})$.

Якщо підставити (19) у нестационарне рівняння Шредингера з гамільтоніаном (9), то можна відділити координатні змінні від часу й одержати таке рівняння:

$$H\psi(\mathbf{r}) = \tilde{E}\psi(\mathbf{r}).$$

Хвильову функцію, унаслідок сферичної симетрії, можна записати у вигляді (11). Отже, одержано радіальне рівняння, яке має розв'язок для різних значень r .

Нехай $r \leq a$. Увівши такі позначення:

$$\begin{aligned} \xi &= \alpha_1 r, & \alpha_1^2 &= 2m_1^* \left(\tilde{E} + U_1^*(a, b) \right) / \hbar^2, \\ \beta_1 &= -m_1^* e^2 / (\varepsilon_1 \hbar^2 \alpha_1), \\ R_1(\xi) &= \rho_1(\xi) / \xi, \end{aligned}$$

радіальне рівняння одержуємо у вигляді рівняння Кулона (15). Розв'язок такого рівняння, що задовольняє умови скінченності хвильової функції, можна записати так:

$$\rho_1(\xi) = C_{11} \frac{2^l e^{-\pi\beta_1/2} |\Gamma(l+1+i\beta_1)|}{\Gamma(2l+2)} \times e^{-i\xi} \xi^{l+1} M(l+1-i\beta_1, 2l+2, 2i\xi). \quad (22)$$

Для області $a < r \leq b$ розв'язок радіального рівняння Шредингера аналогічний до розв'язку (17), якщо зробити заміну $E \rightarrow \tilde{E}$. Якщо ж $r > b$, то після введення безрозмірних величин

$$\begin{aligned} \xi &= \alpha_3 r, & \alpha_3^2 &= 2m_3^* \left(\tilde{E} + U_0 \right) / \hbar^2, \\ \beta_3 &= -m_3^* e^2 / (\varepsilon_1 \hbar^2 \alpha_3), \\ R_3(\xi) &= \rho_3(\xi) / \xi \end{aligned}$$

одержуємо рівняння Кулона. Його загальним розв'язком є дві функції: регулярна кулонівська функція $F_l(\beta_3, \xi)$ і логарифмічна кулонівська функція $G_l(\beta_3, \xi)$ [15]. Згідно з умовою випромінювання потрібно вибрати лише падаючу хвилю. Для цього використано такі міркування. Поведінка функцій $F_l(\beta_3, \xi)$ і $G_l(\beta_3, \xi)$ на великих відстанях ($\xi \rightarrow \infty$) аналогічна до поведінки функцій $\sin(\xi - l\pi/2 + \beta_l - \beta_3 \ln 2\xi)$ та $\cos(\xi - l\pi/2 + \beta_l - \beta_3 \ln 2\xi)$, де $\beta_l = \arg \Gamma(l+1+i\beta_3)$. Тому за аналогією побудовано дві лінійно незалежні функції на основі функцій Кулона [17]:

$$\begin{aligned} Q_l^+(\beta_3, \xi) &= G_l(\beta_3, \xi) + i F_l(\beta_3, \xi), \\ Q_l^-(\beta_3, \xi) &= G_l(\beta_3, \xi) - i F_l(\beta_3, \xi), \end{aligned} \quad (23)$$

які також є розв'язками стаціонарного рівняння Шредингера в цій області. Ураховуючи умову випромінювання, розв'язок радіального рівняння Шредингера записано у вигляді:

$$\rho_3(\xi) = C_{31} Q_l^+(\beta_3, \xi). \quad (24)$$

Хвильова функція та потік густини ймовірності мають бути неперервними на межах гетероструктури. Як і в роботах [9, 12–14], тут використовуємо такі граничні умови:

$$R_1(r)|_{r=a} = R_2(r)|_{r=a},$$

$$R_2(r)|_{r=b} = R_3(r)|_{r=b},$$

$$\frac{1}{m_1^*} \frac{d}{dr} R_1(r) \Big|_{r=a} = \frac{1}{m_2^*} \frac{d}{dr} R_2(r) \Big|_{r=a}, \quad (25)$$

$$\frac{1}{m_2^*} \frac{d}{dr} R_2(r) \Big|_{r=b} = \frac{1}{m_3^*} \frac{d}{dr} R_3(r) \Big|_{r=b}.$$

Третю граничну умову можна отримати з таких міркувань [18]. Рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (9) проінтегровано в нескінченно малій області $r = a - \Delta h/2 \dots a + \Delta h/2$:

$$\int_{a-\Delta h/2}^{a+\Delta h/2} dr \left(-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m^*(r)} \nabla + V(r) + U(r) \right) \psi(r, \theta, \varphi) = \int_{a-\Delta h/2}^{a+\Delta h/2} dr E \psi(r, \theta, \varphi).$$

Одержано

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m^*(r)} \frac{d}{dr} R(r) \right]_{a-\Delta h/2}^{a+\Delta h/2} = \left[E + \frac{1}{2} U_0 \right] R(r)|_{r=a} \Delta h.$$

Тут ураховано, що функція $V(r)$ неперервна, бо вона отримана на основі точного розв'язку рівняння Пуассона. При умові, що $\Delta h \rightarrow 0$, одержано третю граничну умову. Аналогічно отримано й четверту умову. З них, а також умови нормування можна визначити енергію стаціонарних та квазістаціонарних станів і середню тривалість життя частинки в заданому квазістаціонарному стані для двошарової КТ з водневоподібною домішкою.

III. РЕЗУЛЬТАТИ ОБЧИСЛЕНЬ ТА ЇХ АНАЛІЗ

Розрахунок дискретного енергетичного спектра і квазістаціонарних станів електрона проведено для гетеросистеми Si/SiO₂/Si, параметри якої такі: $m_1^* = m_3^* = 0.25 m_e$, $m_2^* = 0.5 m_e$, $\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = 11.7$, $\varepsilon_2 = 2.4$, $U_0 = 3.2$ eV.

На рис. 3 зображено залежність основного стану донора від внутрішнього радіуса КТ (зовнішній радіус $b = 180$ Å). Якщо в обчисленнях вважати, що значення діелектричної проникності для всіх шарів гетероструктури однакове за умови $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 \equiv \varepsilon_{\text{SiO}_2}$, то залежність енергії від радіуса матиме вигляд 1. Коли ж припустити, що $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 \equiv \varepsilon_{\text{Si}}$, то $E(a)$ описується кривою 2, а якщо вважати, що $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 \equiv (\varepsilon_{\text{SiO}_2} + \varepsilon_{\text{Si}})/2$, то енергія основного стану як функція a зобразиться кривою 3. Усі ці три функції мають однакову структуру. Для великого радіуса КТ, коли $a \approx b$, вплив шару зменшується, тому енергетичні рівні гетеросистеми прямують до відповідних енергій водневоподібною домішки в масивному кристалі Si, що зменшені на величину потенціальної U_0 . Якщо $a_0 < a < b$, (25 Å $< a_0 < 50$ Å), то зменшення внутрішнього радіуса КТ спричиняє зростання енергії системи через просторове обмеження. Подальше зменшення радіуса ($a < a_0$) веде до того,

що збільшення кінетичної енергії компенсується потенціальною енергією притягання електрона до йона домішки. Тому в цьому діапазоні енергія практично не залежить від внутрішнього радіуса КТ.

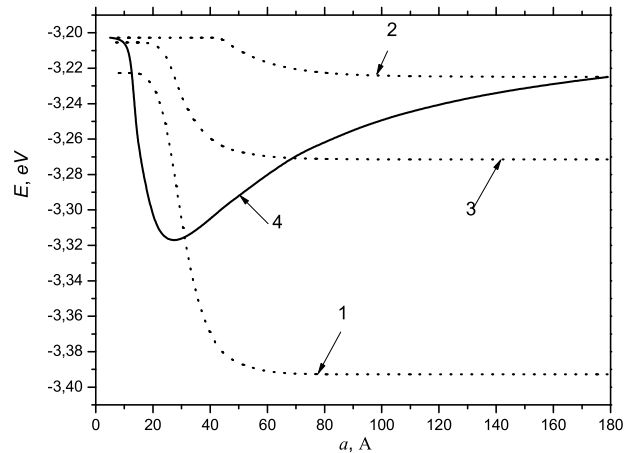


Рис. 3. Енергія основного стану донора у двошаровій КТ.

Одержані розв'язки добре узгоджуються з розв'язками праці [11], якщо в отримані формули, замість ε_1 та ε_2 , підставити середнє значення діелектричної проникності, бо тоді $U_1^*(a, b) = U_0$. Структура розв'язків та порядок слідування енергетичних рівнів збігаються з відповідними результатами інших авторів. Однак ураховання наведеного вище розв'язку рівняння Пуассона якісно вплине на поведінку енергетичних станів при зміні розмірів гетероструктури і приведе до залежності $E = E(a)$ (крива 4). В області $a \approx b$ енергія визначається $E = E_{\text{Si}}$, тому криві 2 і 4 для великих радіусів збігаються. Зменшення внутрішнього радіуса КТ спричиняє спочатку зменшення енергії електрона, а далі її зростання. Зниження енергетичного рівня при зменшенні радіуса a зумов-

лено зростанням ефективної глибини потенціальної ями $U_1^*(a, b)$, а зростання енергії викликано просторовим обмеженням. Подальше зменшення радіуса веде до того, що домішка починає поводитися як водневоподібний атом у масивному кристалі кремнію. У цьому діапазоні відсутня різка зміна енергії і криві 2 та 4 знову наближаються одна до одної.

Крім основного стану, визначено також і збуджені стани. Енергетичні рівні задаються радіальними та

орбітальними квантовими числами n_r, l . На рис. 4 показано залежність $E_{n_r, l}$ від внутрішнього радіуса КТ при сталому зовнішньому радіусі. Видно, що зі зростанням товщини потенціального бар'єра (зменшення внутрішнього радіуса при сталому зовнішньому) до певної величини ($a \approx 30 \text{ \AA}$, якщо $b \approx 200 \text{ \AA}$) 2s та 1p енергетичні стани, які вироджені у вільному водневоподібному атомі, розщеплюються.

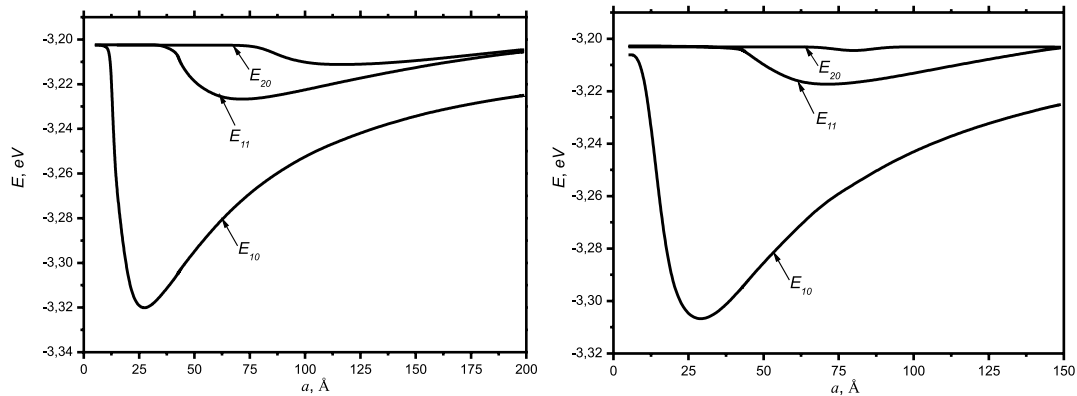


Рис. 4. Залежність енергії водневоподібної домішки у двошаровій КТ від внутрішнього радіуса КТ. Зовнішній радіус $b = 200 \text{ \AA}$ (зліва), $b = 150 \text{ \AA}$ (справа).

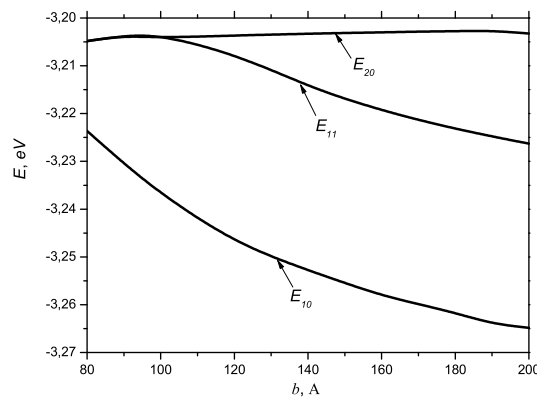


Рис. 5. Залежність енергетичних рівнів водневоподібної домішки від зовнішнього радіуса КТ.

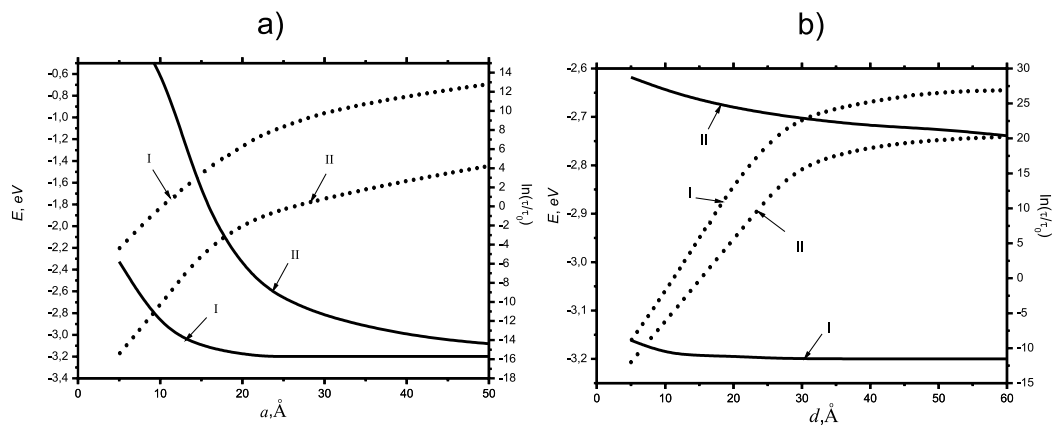


Рис. 6. Енергія квазістаціонарних рівнів (суцільні криві) і відповідні тривалості життя електрона в цих станах (пунктирні криві).

На рис. 5 графічно зображено залежність $E_{n,r,l}$ від зовнішнього радіуса КТ при фіксованому внутрішньому $a = 80 \text{ \AA}$. Як видно з рисунка, зменшення зовнішнього радіуса b КТ спричиняє зростання енергії системи. Це зумовлено зменшенням глибини ефективної потенціальної ями $U_1^*(a, b)$ і збільшенням висоти бар'єра $U_2^*(b)$.

У цій статті також визначено квазістаціонарні рівні та середню тривалість життя електрона домішки. Для цього, на відміну від праці [9], використано інший метод. Одержано комплексне рівняння з комплексним невідомим $E = E - i\hbar\delta/2$. Це рівняння чисельно розділено на дійсну та уявну частини. З отриманої системи рівнянь визначено квазістаціонарні рівні та середню тривалість життя, яка є оберненою величиною до δ .

Слід відзначити, що дискретні енергетичні рівні існують при $E < -U_0$, а квазістаціонарні — при $-U_0 < E < -U_2^*(b) - e^2/\epsilon_2 b$.

На рис. 6,а зображено залежність енергії першого (I) та другого (II) квазістаціонарних S -станів, що знаходяться вище в енергетичній шкалі, ніж стаціонарні стани, і тривалість життя електрона в цих станах як функцію внутрішнього радіуса КТ при фіксованій товщині бар'єра ($d = b - a = 15 \text{ \AA}$). Для зручності зображення залежності тривалості життя електрона введено $\tau_0 = 82.48 \text{ ns}$, який є середньою тривалістю життя електрона в S -стані (I) для внутрішнього радіуса КТ $a = 10 \text{ \AA}$ і $d = 15 \text{ \AA}$.

Із рис. 6,а видно, що збільшення внутрішнього радіуса КТ спричиняє зниження енергії квазістаціонарних рівнів і зростання тривалості життя електрона в цих станах, причому тривалість життя в області $5 \text{ \AA} < a < 20 \text{ \AA}$ зростає досить швидко, а потім швидкість зростання зменшується. Наприклад, для $a = 20 \text{ \AA}$ се-

редня тривалість життя в першому квазістаціонарному S -стані $\tau = 48.95 \mu\text{s}$, а для радіуса $a = 40 \text{ \AA}$ — $\tau = 48.95 \text{ ms}$. Цей процес можна пояснити зменшенням просторового обмеження заряду і збільшенням "потужності" бар'єра. На відміну від дискретних енергетичних рівнів, квазістаціонарні рівні монотонно зменшуються зі збільшенням радіуса КТ.

Аналогічні залежності одержуємо для енергій та середньої тривалості життя розглянутих станів зі змінною шириною бар'єра при сталому внутрішньому радіусі ($a = 25 \text{ \AA}$) двошарової КТ (рис. 6,б). Як видно з рисунка, збільшення товщини бар'єра спричиняє незначне зменшення енергії, що пов'язано з залежністю ефективних ям від радіусів КТ (6), (7). Зростання тривалості життя електрона в цих станах пояснюється збільшенням шару SiO_2 , тобто зростанням бар'єра. Для $a < 20 \text{ \AA}$ тривалість життя зростає досить швидко, однак для більших радіусів зростання дещо уповільнюється.

Отже, у цій статті на основі точного розв'язку рівняння Пуассона для позитивно зарядженого йона домішки в центрі двошарової КТ одержано загальну формулу для повної потенціальної енергії електрона, введено ефективні потенціальні ями для електрона в гетероструктурі. З отриманою потенціальною енергією точно розв'язано рівняння Шредингера для дискретного спектра водневоподібної домішки. Також досліджено поведінку квазістаціонарних енергетичних рівнів і визначено середню тривалість життя частинки в цих станах. Обчислення показали, що врахування різних значень діелектричних проникностей гетеросистеми значно змінюють енергетичний спектр водневоподібної домішки у тришаровій сферичній наногетероструктурі.

-
- [1] Jia-Zin Zhu, Phys. Rev. B, **39**, 8780 (1989).
 [2] Jia-Zin Zhu, Phys. Rev. B, **41**, 6001 (1990).
 [3] Jia-Zin Zhu, Phys. Rev. B, **50**, 4497 (1994).
 [4] Chun-Ching Yang, Li-Chi Liu, and Shih-Hsin Chang, Phys. Rev. B, **58**, 1954 (1998).
 [5] М. В. Ткач, В. А. Головацький, Я. М. Березовський, Фіз. хім. тв. тіла **4**, 213 (2003).
 [6] D. Schooss, A. Mews, A. Eychmuller, H. Weller, Phys. Rev. B **49**, 17072 (1994).
 [7] A. Mews, A. V. Kadavanich, U. Banin, A. P. Alivasatos, Phys. Rev. B **53**, R13242 (1996).
 [8] B. O. Dabbousi, J. Rodriguez-Viejo, F. V. Mikulec, J. R. Heine, H. Mattoussi, R. Ober, K. F. Jensen, M. G. Bawendi, J. Phys. Chem. **101**, 9463 (1997).
 [9] Н. В. Ткач, В. А. Головацький, Фіз. тв. тіла **41**, 2081 (1999).
 [10] S. Chaudhuri, Phys. Rev. B **28**, 4480 (1983).
 [11] Cheng-Ying Hsieh, Chin. J. Phys. **38**, 478 (2000).
 [12] В. І. Бойчук, Р. Ю. Кубай, Г. М. Годованець, І. С. Шевчук, Журн. фіз. досл. **10**, 220 (2006).
 [13] І. М. Купчак, Д. В. Корбутяк, Ю. В. Крюченко, А. В. Саченко, І. О. Соколовський, О. М. Сресели, Фіз. техн. полупр. **40**, 98 (2006).
 [14] М. В. Ткач, О. М. Войцехівська, В. А. Головацький, О. М. Маханець, А. М. Гришук, Журн. фіз. досл. **10**, 315 (2006).
 [15] Д. І. Блохинцев, *Основы квантовой механики* (Высшая школа, Москва, 1961).
 [16] *Справочник по специальным функциям*, под ред. М. Абрамовиц, И. Стиган (Наука, Москва, 1979).
 [17] А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяния, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике* (Наука, Москва, 1971).
 [18] C. L. Tang, *Fundamentals of Quantum Mechanics For Solid State Electronics and Optics* (Cambridge University Press, New York, 2005).

В. І. БОЙЧУК, І. В. БІЛИНСЬКИЙ, Р. Я. ЛЕШКО, Л. Я. ВОРОНЯК

**THE DISCRETE AND QUASI-STATIONARY STATES OF HYDROGENIC IMPURITY
IN THE OPENED SPHERICAL NANOHETEROSTRUCTURE**

V. I. Boichuk, I. V. Bilynskyi, R. Ya. Leshko, L. Ya. Voronyak
*Department of Theoretical Physics,
Institute of Physics, Mathematics and Computer Science,
Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University,
3, Stryiska St., 82100, Drohobych*

The discrete and quasi-stationary states of hydrogenic impurity for a varied radius of a quantum dot in effective mass approximation were calculated for the Si/SiO₂/Si spherical nanoheterostructure based on the exact solution of the Poisson and Schrödinger equations. The dependence of the energy of impurity and the average time of life of the electron in quasi-stationary states on the internal and external radiuses of the quantum dot were defined and analyzed.