

СПЕКТРИ ДІРОК ТА АКЦЕПТОРІВ У ДВОШАРОВІЙ СФЕРИЧНІЙ КВАНТОВІЙ ТОЧЦІ

В. І. Бойчук, І. В. Білинський, Р. Я. Лешко

*Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,
кафедра теоретичної фізики,
вул. Стрийська, 3, м. Дрогобич, 82100*

(Отримано 25 вересня 2009 р.; в остаточному вигляді — 6 травня 2010 р.)

Для двошарової сферичної наногетероструктури Si/SiO₂/вакуум, нехтуючи гофрованістю ізоенергетичних поверхонь у k -просторі, на основі гамільтоніана 3×3 обчислено енергію дискретних станів дірки та водневоподібної акцепторної домішки як функцію розмірів квантової точки. Одержано точні розв'язки всіх радіальних рівнянь для дірки без домішки та двох типів станів з акцепторною домішкою. Матричне радіальне рівняння для дірки акцепторної домішки розв'язано наближеними методами квантової механіки. Визначено вплив поляризаційних зарядів, що виникають на гетеромежах, на енергетичний спектр дірки. Установлено діапазони розмірів квантової точки, у межах яких гетеромежі вагомо впливають на енергію дірки.

Ключові слова: акцепторна домішка, багатозонна модель, двошарова квантова точка.

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

I. ВСТУП

Сучасні експериментальні методи дають змогу створювати багатошарові квантові точки (КТ) як закритого, так і відкритого типу [1–3]. Для сферично-симетричних багатошарових КТ гетероструктур з урахуванням простого параболічного закону дисперсії квазічастинок, моделі прямокутних сферично-симетричних потенціальних ям і бар'єрів методом S -матриці одержано розв'язки відповідних рівнянь Шредингера [4–5]. Визначено залежності енергетичних спектрів частинок від геометричних розмірів шарів наногетероструктури.

У більшості кристалів, що утворюють гетеросистеми, структура валентної зони є складною й виродженою в точці $k = 0$, тоді як зону провідності цих кристалів можна описувати простим квадратичним законом дисперсії. Тому, щоб дослідити власні стани дірки в КТ, необхідно врахувати складний зонний спектр. На основі теорії Латтінджера [6–7] автори праць [8–10] у межах чотири-, шести-, та восьмизонних гамільтоніанів одержали розв'язки рівняння Шредингера для дірки у простій сферичній КТ. Співвідношення між енергетичними зонними параметрами для кремнієвих КТ таке, що при обчисленні діркових станів можна використовувати тризонний гамільтоніан. Саме такий підхід реалізовано в роботі [11]. Застосовуючи восьмизонну модель до багатошарової сферичної КТ, у статті [12] визначено електронні та діркові s - і p -стани, побудовано радіальні компоненти хвильової функції залежно від розмірів КТ.

Наявність дефектів, зокрема домішок, у КТ значно змінюють локалізовані стани носіїв. У працях [13–15] одержано розв'язки рівняння Шредингера для електрона водневоподібної домішки в центрі простої сфе-

ричної КТ. Показано різницю між отриманими результатами за наявності домішки та при її відсутності. Дискретні стани водневоподібної донорної домішки в центрі сферично-симетричної двошарової КТ обчислено у [16], досліджено генезис енергетичних рівнів при зміні розмірів шарів КТ, розглянуто граничний випадок переходу багатошарової КТ в одношарову.

Незважаючи на те, що значна кількість робіт присвячена дослідженню акцепторних станів як у масивних кристалах [17–18], так і наногетероструктурах з КТ, актуальним усе ще є завдання побудови послідовної теорії акцепторних домішок у багатошарових КТ. Беручи до уваги залежність електронних, діркових, донорних та екситонних станів від діелектричних властивостей матриці гетеросистеми [19–22], важливо визначити вплив поляризаційних зарядів і на акцепторну домішку в багатошаровій КТ. Отже, мета цієї статті полягає в дослідженні діркових та домішкових станів закритої сферичної двошарової КТ, визначенні впливу геометричних розмірів та діелектричних властивостей шарів КТ на одночастинкові стани. Конкретні обчислення проведено для сферичної гетеросистеми Si/SiO₂/вакуум.

II. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ ТА ЇЇ РОЗВ'ЯЗАННЯ

A. Дірковий гамільтоніан 3×3 і хвильові функції

Розглянуто двошарову КТ (рис. 1), поміщену в матрицю. У центрі такої системи є негативно заряджений йон акцепторної домішки. Радіус внутрішнього шару — a , зовнішнього — b , тому $a \leq b$. Внутрішній шар має

діелектричну проникність ε_1 , а зовнішній шар КТ — ε_2 . Діелектрична проникність матриці ε_3 .

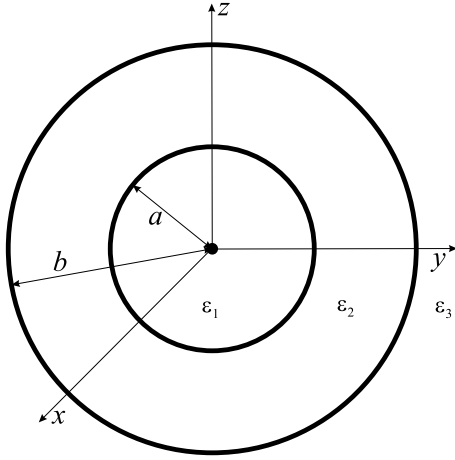


Рис. 1. Модель двошарової сферичної КТ.

Уважаємо, що гетеросистема утворена кристалами з великою забороненою зоною E_g і слабкою спіно-орбітальною взаємодією Δ [23]. Тому можна знехтувати зоною провідності та вважати, що $\Delta \rightarrow 0$.

Для спрощення запису формул для дірки вісь відліку енергії у валентній зоні направлено “вниз” і вибрано систему одиниць, де $m_0 = 1$, $\hbar = 1$, $e = 1$. Ураховуючи зазначене вище та нехтуючи гофрованістю ізоенергетичних поверхонь (сферичне наближення), kp -гамільтоніан системи можна записати у вигляді [24]:

$$\mathbf{H} = - \left[(A + 2B) \mathbf{p}^2 - 3B (\mathbf{p}\mathbf{J})^2 \right] + \Pi(r), \quad (1)$$

де $A = -\gamma_1/2$, $B = -\gamma$, $\mu = 2\gamma/\gamma_1$, $\gamma = 1/5 (3\gamma_3 + 2\gamma_2)$, $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ - параметри Латгінджера. Оператор спінового моменту \mathbf{J} відповідає спінові 1. Потенціальна енергія дірки є сумою трьох енергій:

$$\Pi(r) = U(r) + V_c(r) + V_p(r). \quad (2)$$

Енергія $U(r)$, що зумовлена розривом зон, вибрана у вигляді сферично-симетричної прямокутної потенціальної ями:

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a, \\ U_0, & a < r \leq b, \\ \infty, & b < r. \end{cases} \quad (3)$$

На основі розв'язку рівняння Пуассона енергію взаємодії йона акцептора з діркою $V_c(r)$ записано такою формулою:

$$V_c(r) = \begin{cases} -\frac{1}{\varepsilon_1 r} - \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 a} - \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_3}{\varepsilon_2 \varepsilon_3 b}, & r \leq a, \\ -\frac{1}{\varepsilon_2 r} - \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_3}{\varepsilon_2 \varepsilon_3 b}, & a < r \leq b, \\ -\frac{1}{\varepsilon_3 r}, & r > b. \end{cases} \quad (4)$$

У потенціальній енергії (2) враховано також те, що дірка індукує поляризаційні заряди та взаємодіє з ними. Потенціальну енергію цієї взаємодії $V_p(r)$ можна записати так:

$$V_p(r) = \begin{cases} W_1(r), & r \leq a, \\ W_2(r), & a < r \leq b, \\ W_3(r), & r > b, \end{cases} \quad (5)$$

$$W_1(r) = \frac{1}{2a\varepsilon_1} \left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \right) \left\{ \frac{a^2}{a^2 - r^2} + \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} F \left(1, \alpha_1; \alpha_1 + 1; \left(\frac{r}{a} \right)^2 \right) \right\} + \frac{1}{2a} \frac{\varepsilon_2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{r}{a} \right)^{2n} \frac{(2n+1)^2}{(\varepsilon_1 n + \varepsilon_2 (n+1)) n} \frac{1}{Z_n},$$

$$W_2(r) = \frac{1}{2a\varepsilon_2} \left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \right) \left\{ \frac{a^2}{a^2 - r^2} + \left(\frac{a}{r} \right)^2 F \left(1, \alpha_1; \alpha_1 + 1; \left(\frac{a}{r} \right)^2 \right) \right\} + \frac{1}{2b\varepsilon_2} \left(\frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_3}{\varepsilon_2 + \varepsilon_3} \right) \left\{ \frac{b^2}{b^2 - r^2} + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_3} F \left(1, \alpha_2; \alpha_2 + 1; \left(\frac{r}{b} \right)^2 \right) \right\} + \frac{1}{2r\varepsilon_2} \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \left(\frac{a}{r} \right)^{2n+1} \frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) n}{(\varepsilon_1 n + \varepsilon_2 (n+1))} - \left(\frac{r}{b} \right)^{2n+1} \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_3) (n+1)}{(\varepsilon_2 n + \varepsilon_3 (n+1))} - 2 \right\} \frac{1}{Z_n},$$

$$W_3(r) = \frac{1}{2b\varepsilon_3} \left(\frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_3}{\varepsilon_2 + \varepsilon_3} \right) \left\{ \frac{b^2}{b^2 - r_0^2} + \left(\frac{b}{r} \right)^2 F \left(1, \alpha_2; \alpha_2 + 1; \left(\frac{b}{r} \right)^2 \right) \right\} - \frac{1}{2r} \frac{\varepsilon_2}{(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{b}{r} \right)^{2n+1} \frac{(2n+1)^2}{(\varepsilon_2 n + \varepsilon_3 (n+1)) (n+1)} \frac{1}{Z_n},$$

$$Z_n = 1 + \left(\frac{b}{a} \right)^{2n+1} \frac{1}{n(n+1)} \frac{(\varepsilon_1 n + \varepsilon_2 (n+1)) (\varepsilon_2 n + \varepsilon_3 (n+1))}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) (\varepsilon_2 - \varepsilon_3)}, \alpha_1 = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}, \alpha_2 = \frac{\varepsilon_3}{\varepsilon_2 + \varepsilon_3},$$

$F(a, b, c; x)$ — узагальнена гіпергеометрична функція [25].

Хвильову функцію, що є власною функцією гамільтоніана (1), можна записати як добуток радіальної частини на власну функцію квадрата повного моменту імпульсу $\mathbf{F}^2 = (\mathbf{J} + \mathbf{L})^2$:

$$\Phi_{f,M}^l(\theta, \varphi) = \sum_{m=-l}^l \sum_{m_j=-1}^1 C_{l,m;1,m_j}^{f,M} Y_{l,m}(\theta, \varphi) \chi_{m_j}, \quad (6)$$

де $f(f+1)$, $l(l+1)$, M , m , m_j у вибраній системі оди-

ниць є власними значеннями операторів \mathbf{F}^2 , \mathbf{L}^2 , \mathbf{F}_z , \mathbf{L}_z , \mathbf{J}_z відповідно, $C_{l,m;1,m_j}^{f,M}$ — коефіцієнти Клебша-Гордана, χ_{m_j} — спінові функції, $Y_{l,m}$ — сферичні гармоніки, які є власними функціями оператора \mathbf{L}^2 . Ураховуючи загальні правила додавання моментів імпульсу, найзагальнішу форму розв'язків рівняння Шредингера з гамільтоніаном (1) можна записати для трьох типів станів [11, 17]:

$$\psi_{f,M}^{f-1,f+1}(\mathbf{r}) = R_f^{f-1}(r) \Phi_{f,M}^{f-1}(\theta, \varphi) + R_f^{f+1}(r) \Phi_{f,M}^{f+1}(\theta, \varphi), \quad (f \geq 1; l = f-1, f+1), \quad (7)$$

$$\psi_{f,M}^f(\mathbf{r}) = R_f^f(r) \Phi_{f,M}^f(\theta, \varphi), \quad (f \geq 1; l = f), \quad (8)$$

$$\psi_{0,0}^1(\mathbf{r}) = R_0^1(r) \Phi_{0,0}^1(\theta, \varphi), \quad (f = 0; l = 1). \quad (9)$$

Якщо підставляти функції (7)–(9) у рівняння Шредингера з гамільтоніаном (1), домножити зліва на відповідні спряжені спінори $\Phi_{f,M}^l(\theta, \varphi)$ і проінтегрувати за кутовими змінними, то для заданих станів одержимо такі радіальні рівняння:

$$A \begin{pmatrix} C_1 \mathbf{B}_{f-2}^+ \mathbf{B}_{f-1}^- & C_2 \mathbf{B}_f^- \mathbf{B}_{f+1}^- \\ C_2 \mathbf{B}_f^+ \mathbf{B}_{f-1}^+ & C_3 \mathbf{B}_{f+2}^- \mathbf{B}_{f+1}^+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_f^{f-1} \\ R_f^{f+1} \end{pmatrix} + \Pi(r) \begin{pmatrix} R_f^{f-1} \\ R_f^{f+1} \end{pmatrix} - E \begin{pmatrix} R_f^{f-1} \\ R_f^{f+1} \end{pmatrix} = 0, \quad (10)$$

$$A(1 - \mu) (\Delta_f R_f^f) + \Pi(r) R_f^f - E R_f^f = 0, \quad (11)$$

$$A(1 + 2\mu) (\Delta_1 R_0^1) + \Pi(r) R_0^1 - E R_0^1 = 0. \quad (12)$$

У формулах (10)–(12) уведено позначення:

$$\Delta_l = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2}, \quad \mathbf{B}_l^+ = \frac{d}{dr} - \frac{l}{r},$$

$$\mathbf{B}_l^- = \frac{d}{dr} + \frac{(l+1)}{r},$$

В. Власні стани дірки без домішки

Нехай акцепторна домішка відсутня у КТ. Тоді у формулі (2) необхідно врахувати, що $V_c(r) = 0$. Доданок $V_p(r)$, що описує взаємодію дірки з поляриза-

ційними зарядами, на порядок менший від $U(r)$. Тому в нульовому наближенні виразом (5) можна знехтувати. У цьому випадку три рівняння (10)–(12) матимуть

точні розв'язки. У внутрішній області КТ ($r \leq a$) розв'язки відповідних рівнянь запишемо за допомогою сферичних функцій Бесселя першого роду:

$$\begin{aligned} (R_f^{f-1})_1 &= D_{11}j_{f-1}(\lambda_1 r/a) + D_{21}j_{f-1}(\lambda_1 \beta_1 r/a), \\ (R_f^{f+1})_1 &= -D_{11}\sqrt{\frac{f}{f+1}}j_{f+1}(\lambda_1 r/a) + D_{21}\sqrt{\frac{f+1}{f}}j_{f+1}(\lambda_1 \beta_1 r/a), \end{aligned} \quad (13)$$

$$(R_f^f)_1 = D_{f,f,1}j_f(\lambda_1 r/a), \quad (14)$$

$$(R_0^1)_1 = D_{1,0,1}j_1(\lambda_1 \beta_1 r/a), \quad (15)$$

де $\lambda_1 = \sqrt{\frac{-Ea^2}{A_1(1-\mu_1)}}$, $\beta_1 = \sqrt{\frac{1-\mu_1}{1+2\mu_1}}$.

Якщо розглядати другий шар ($a < r \leq b$), то необхідно врахувати два випадки: $0 < E < U_0$ і $E > U_0$. Коли $0 < E < U_0$, то розв'язки рівнянь у розгляданій області можна записати за допомогою модифікованих сферичних функцій Бесселя першого та другого роду:

$$\begin{aligned} (R_f^{f-1})_2 &= D_{12}i_{f-1}(\lambda_2 r/a) + D_{22}i_{f-1}(\lambda_2 \beta_2 r/a) + B_{12}k_{f-1}(\lambda_2 r/a) + B_{22}k_{f-1}(\lambda_2 \beta_2 r/a), \\ (R_f^{f+1})_2 &= D_{12}\sqrt{\frac{f}{f+1}}i_{f+1}(\lambda_2 r/a) - D_{22}\sqrt{\frac{f+1}{f}}i_{f+1}(\lambda_2 \beta_2 r/a) \\ &+ B_{12}\sqrt{\frac{f}{f+1}}k_{f+1}(\lambda_2 r/a) - B_{22}\sqrt{\frac{f+1}{f}}k_{f+1}(\lambda_2 \beta_2 r/a), \end{aligned} \quad (16)$$

$$(R_f^f)_2 = D_{f,f,2}i_f(\lambda_2 r/a) + B_{f,f,2}k_f(\lambda_2 r/a), \quad (17)$$

$$(R_0^1)_2 = D_{1,0,2}i_1(\lambda_2 \beta_2 r/a) + B_{1,0,2}k_1(\lambda_2 \beta_2 r/a), \quad (18)$$

де $\lambda_2 = \sqrt{\frac{-(-E+U_0)a^2}{A_2(1-\mu_2)}}$, $\beta_2 = \sqrt{\frac{1-\mu_2}{1+2\mu_2}}$. Якщо $E > U_0$, то розв'язки зручно зобразити за допомогою сферичних функцій Бесселя першого роду і функцій Ноймана:

$$\begin{aligned} (R_f^{f-1})_2 &= D_{12}j_{f-1}(\lambda_2 r/a) + D_{22}j_{f-1}(\lambda_2 \beta_2 r/a) + B_{12}n_{f-1}(\lambda_2 r/a) + B_{22}n_{f-1}(\lambda_2 \beta_2 r/a), \\ (R_f^{f+1})_2 &= -D_{12}\sqrt{\frac{f}{f+1}}j_{f+1}(\lambda_2 r/a) + D_{22}\sqrt{\frac{f+1}{f}}j_{f+1}(\lambda_2 \beta_2 r/a) \\ &- B_{12}\sqrt{\frac{f}{f+1}}n_{f+1}(\lambda_2 r/a) + B_{22}\sqrt{\frac{f+1}{f}}n_{f+1}(\lambda_2 \beta_2 r/a), \end{aligned} \quad (19)$$

$$(R_f^f)_2 = D_{f,f,2}j_f(\lambda_2 r/a) + B_{f,f,2}n_f(\lambda_2 r/a), \quad (20)$$

$$(R_0^1)_2 = D_{1,0,2}j_1(\lambda_2 \beta_2 r/a) + B_{1,0,2}n_1(\lambda_2 \beta_2 r/a), \quad (21)$$

де $\lambda_2 = \sqrt{\frac{(-E+U_0)a^2}{A_2(1-\mu_2)}}$, $\beta_2 = \sqrt{\frac{1-\mu_2}{1+2\mu_2}}$.

Оскільки потенціальна енергія дірки (3) в матриці вважається нескінченно великою, то відповідні радіальні множники хвильової функції дорівнюють нулеві в усій цій області. Маючи точні розв'язки, можна визначити енергію дірки, а вплив поляризаційних зарядів урахувати в першому порядку теорії збурень.

С. Енергетичний спектр дірки акцепторної домішки

Нехай у центрі КТ є акцепторна домішка. Розглянемо спочатку рівняння (11)–(12) для станів другого і третього типу. Як і в попередньому пункті, у нульовому наближенні доданком $V_p(r)$ нехтуємо, а його вплив урахуємо за теорією збурень.

Якщо $r \leq a$, то рівняння (11)–(12) можна записати компактно за допомогою одного рівняння:

$$-\frac{1}{2t_1} (\Delta_n R_1) - \frac{1}{\varepsilon_1 r} R_1 - \tilde{E}_1 R_1 = 0. \quad (22)$$

Для станів другого типу $t_1 = 1/\gamma_1^{(1)} (1 - \mu_1)$, $\Delta_n = \Delta_f$, $R_1 = (R_f^f)_1$, а для станів третього типу $t_1 = 1/\gamma_1^{(1)} (1 + 2\mu_1)$, $\Delta_n = \Delta_1$, $R_1 = (R_0^1)_1$. У двох випадках $\tilde{E}_1 = E + U^*(a)$, $U^*(a, b) = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/\varepsilon_1 \varepsilon_2 a + (\varepsilon_2 - \varepsilon_3)/\varepsilon_2 \varepsilon_3 b$. Рівняння (22) необхідно розв'язувати у двох діапазонах енергії: $\tilde{E}_1 < 0$, $\tilde{E}_1 > 0$.

Якщо $\tilde{E}_1 < 0$, то зручно ввести такі позначення: $\xi_1 = \alpha_1 r$, $(\alpha_1)^2 = -8t_1 \tilde{E}_1$, $\lambda_1 = 2t_1/(\varepsilon_1 \alpha_1)$, $R_1(\xi_1) = g_1(\xi_1)/\xi_1$, з якими рівняння (22) зведеться до рівняння Віттекера:

$$\frac{\partial^2}{(\partial \xi_1)^2} g_1 + \left[-\frac{1}{4} + \frac{\lambda_1}{\xi_1} - \frac{n(n+1)}{(\xi_1)^2} \right] g_1 = 0. \quad (23)$$

Розв'язком (23) у розгляданій області є функція Віттекера $M_{\lambda_1, n+1/2}(\xi_1)$ [25]:

$$g_1(\xi_1) = D_1 e^{-\xi_1/2} (\xi_1)^{n+1} \times M(n+1 - \lambda_1, 2n+2, \xi_1), \quad (24)$$

де $M(a, b, x)$ – гіпергеометрична функція 1-го роду (функція Куммера) [25]. Коли ж $\tilde{E}_1 > 0$, то, провівши заміну змінних $\xi_1 = \beta_1 r$, $(\beta_1)^2 = 2t_1 \tilde{E}_1$, $\delta_1 = -t_1/(\varepsilon_1 \beta_1)$, $R_1(\xi_1) = g_1(\xi_1)/\xi_1$, рівняння (22) зведемо до рівняння Кулона:

$$\frac{\partial^2}{(\partial \xi_1)^2} g_1 + \left[1 - \frac{2\delta_1}{\xi_1} - \frac{n(n+1)}{(\xi_1)^2} \right] g_1 = 0, \quad (25)$$

розв'язок якого в цій області можна записати за допомогою регулярної функції Кулона $F_n(\delta_1, \xi_1)$. Її можна виразити через гіпергеометричну функцію 1-го роду [25]:

$$g_1(\xi_1) = D_1 \frac{2^n e^{-\pi \delta_1/2} |\Gamma(n+1 + i\delta_1)|}{\Gamma(2n+2)} e^{-i\xi_1} (\xi_1)^{f+1} \times M(n+1 - i\delta_1, 2n+2, 2i\xi_1), \quad (26)$$

де $\Gamma(z)$ – гамма-функція Ейлера [25].

Якщо $a < r \leq b$, то рівняння (11)–(12) так само можна записати компактно:

$$-\frac{1}{2t_2} (\Delta_n R_2) - \frac{1}{\varepsilon_2 r} R_2 - \tilde{E}_2 R_2 = 0, \quad (27)$$

де для станів другого типу $t_2 = 1/\gamma_1^{(2)} (1 - \mu_2)$, $\Delta_n = \Delta_f$, $R_2 = (R_f^f)_2$, а для станів третього типу $t_2 = 1/\gamma_1^{(2)} (1 + 2\mu_2)$, $\Delta_n = \Delta_1$, $R_2 = (R_0^1)_2$, $\tilde{E}_2 = E - U_0 + U^*(b)$, $U^*(b) = (\varepsilon_2 - \varepsilon_3)/\varepsilon_2 \varepsilon_3 b$. На відміну від одношарових КТ, рівняння (27) у цій області потрібно розглядати для двох діапазонів зміни енергії: $\tilde{E}_2 < 0$, $\tilde{E}_2 > 0$.

Якщо $\tilde{E}_2 < 0$, то заміною змінних $\xi_2 = \alpha_2 r$, $(\alpha_2)^2 = -8t_2 \tilde{E}_2$, $\lambda_2 = 2t_2/(\varepsilon_2 \alpha_2)$, $R_2(\xi_2) = g_2(\xi_2)/\xi_2$ рівняння (27) можна звести до рівняння Віттекера, розв'язки якого можна записати за допомогою функцій Віттекера [25]:

$$g_2(\xi_2) = D_2 M_{\lambda_2, n+1/2}(\xi_2) + B_2 W_{\lambda_2, n+1/2}(\xi_2). \quad (28)$$

У випадку $\tilde{E}_2 > 0$ рівняння (27) можна звести до рівняння Кулона, зробивши заміну змінних $\xi_2 = \beta_2 r$, $(\beta_2)^2 = 2t_2 \tilde{E}_2$, $\delta_2 = -t_2/(\varepsilon_2 \beta_2)$, $R_2(\xi_2) = g_2(\xi_2)/\xi_2$. Розв'язок одержаного рівняння представлено за допомогою регулярної та логарифмічної функції Кулона [25]:

$$g_2(\xi_2) = D_2 F_n(\delta_2, \xi_2) + B_2 G_n(\delta_2, \xi_2). \quad (29)$$

Рівняння (10) для акцепторної домішки, навіть при нехтуванні доданком $V_p(r)$, точних розв'язків не має. Тому його розв'язок шукатимемо у вигляді розкладу точної хвильової функції акцептора на функціях задачі без домішки:

$$\begin{pmatrix} (R_f^{f-1})_a \\ (R_f^{f+1})_a \end{pmatrix} = \sum_i c_i \begin{pmatrix} (R_f^{f-1})^i \\ (R_f^{f+1})^i \end{pmatrix}. \quad (30)$$

Підставляючи (30) у (10) і домножуючи на спряжений вектор-рядок $\left((R_f^{f-1})^{i'*} \quad (R_f^{f+1})^{i'*} \right)$, одержуємо однорідну систему рівнянь для коефіцієнтів c_i :

$$\sum_i ((E_i - E_a) \delta_{i'i} + V_{i'i}) c_i = 0, \quad (31)$$

де E_i – i -й енергетичний рівень дірки без домішки, що визначається розв'язками (13)–(21),

$$V_{i'i} = \int dr r^2 (V_c(r) + V_p(r)) \times \left[(R_f^{f-1})^{i'*} (R_f^{f-1})^i + (R_f^{f+1})^{i'*} (R_f^{f+1})^i \right].$$

Прирівнюючи визначник однорідної системи (31) до нуля, одержимо рівняння для знаходження E_a – енергії дірки за наявності акцепторної домішки.

Для обчислення енергетичного спектра необхідно застосувати граничні умови на межах гетероструктури. Із неперервності хвильових функцій на межі гетероструктури можна отримати рівняння:

$$\begin{aligned} \left(\begin{array}{c} (R_f^{f-1})_1 \\ (R_f^{f+1})_1 \end{array} \right) \Big|_{r=a} &= \left(\begin{array}{c} (R_f^{f-1})_2 \\ (R_f^{f+1})_2 \end{array} \right) \Big|_{r=a}, \quad (R_f^f)_1 \Big|_{r=a} = (R_f^f)_2 \Big|_{r=a}, \quad (R_0^1)_1 \Big|_{r=a} = (R_0^1)_2 \Big|_{r=a}, \\ \left(\begin{array}{c} (R_f^{f-1})_2 \\ (R_f^{f+1})_2 \end{array} \right) \Big|_{r=b} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (R_f^f)_2 \Big|_{r=b} = 0, \quad (R_0^1)_2 \Big|_{r=b} = 0. \end{aligned} \quad (32)$$

Із неперервності нормального складника оператора вектора швидкості $\mathbf{V}_r = \mathbf{r}/r (\partial \mathbf{H} / \partial \mathbf{p})$, що пропорційний потоковій густині ймовірності через сферичну поверхню КТ, одержано ще три рівняння для радіальних компонентів хвильової функції

$$\begin{aligned} \left(\begin{array}{cc} \mathbf{T}_{11}^{(1)} & \mathbf{T}_{12}^{(1)} \\ \mathbf{T}_{21}^{(1)} & \mathbf{T}_{22}^{(1)} \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} (R_f^{f-1})_1 \\ (R_f^{f+1})_1 \end{array} \right) \Big|_{r=a} &= \left(\begin{array}{cc} \mathbf{T}_{11}^{(2)} & \mathbf{T}_{12}^{(2)} \\ \mathbf{T}_{21}^{(2)} & \mathbf{T}_{22}^{(2)} \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} (R_f^{f-1})_2 \\ (R_f^{f+1})_2 \end{array} \right) \Big|_{r=a}, \\ A_1 (1 - \mu_1) \frac{d}{dr} (R_f^f)_1 \Big|_{r=a} &= A_2 (1 - \mu_2) \frac{d}{dr} (R_f^f)_2 \Big|_{r=a}, \\ A_1 (1 + 2\mu_1) \frac{d}{dr} (R_0^1)_1 \Big|_{r=a} &= A_2 (1 + 2\mu_2) \frac{d}{dr} (R_0^1)_2 \Big|_{r=a}. \end{aligned} \quad (33)$$

У формулах (32)–(33) використано такі позначення:

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{11}^{\{\frac{1}{2}\}} &= A^{\{\frac{1}{2}\}} \left[\left(1 + \frac{f-1}{2f+1} \mu^{\{\frac{1}{2}\}} \right) \frac{d}{dr} + \frac{3(f-1)}{2(2f+1)} \frac{\mu^{\{\frac{1}{2}\}}}{r} \right], \\ \mathbf{T}_{12}^{\{\frac{1}{2}\}} &= \frac{3\sqrt{f(f+1)}}{2f+1} B^{\{\frac{1}{2}\}} \left(\frac{d}{dr} + \frac{f+2}{r} \right), \quad \mathbf{T}_{21}^{\{\frac{1}{2}\}} = \frac{3\sqrt{f(f+1)}}{2f+1} B^{\{\frac{1}{2}\}} \left(\frac{d}{dr} - \frac{f-1}{r} \right), \\ \mathbf{T}_{22}^{\{\frac{1}{2}\}} &= A^{\{\frac{1}{2}\}} \left[\left(1 + \frac{f+2}{2f+1} \mu^{\{\frac{1}{2}\}} \right) \frac{d}{dr} + \frac{3}{2} \frac{f+2}{2f+1} \frac{\mu^{\{\frac{1}{2}\}}}{r} \right]. \end{aligned}$$

За допомогою рівнянь (32)–(33) можна визначити енергетичний спектр дірки й акцепторної домішки. Якщо через n ($n = 1, 2, \dots$) позначити номер розв'язку відповідної системи рівнянь, то, крім зазначених квантових чисел, енергія та хвильова функція залежатимуть від ще одного квантового числа n . Тому функції (7)–(9) можна перепозначити так: $\psi_{f,M}^{f-1,f+1} \equiv \psi_{n,f,M}^{f-1,f+1}$; $\psi_{f,M}^f \equiv \psi_{n,f,M}^f$; $\psi_{0,0}^1 \equiv \psi_{n,0,0}^1$. Такі позначення буде зручно використовувати для аналізу результатів.

ІІІ. АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Числові розрахунки дискретного енергетичного спектра проведено для КТ наногетеросистеми Si/SiO₂/вакуум, параметри якої вибрано такими ж,

як у [11, 17]. Зважаючи на значну кількість робіт, де показано, що властивості КТ залежать від діелектричної проникності матриці, у запропонованій статті всюди враховано вплив поляризаційних зарядів, що виникають на гетеромежах, на енергетичні спектри дірки. Оскільки діелектричні проникності гетероструктури $\varepsilon_1 = \varepsilon_{Si} > \varepsilon_2 = \varepsilon_{SiO_2} > \varepsilon_3 = 1$, то вплив потенціалу самодії для всіх радіусів КТ буде додатним. На рис. 2 подано результати обчислення основного і збуджених станів для різних внутрішніх радіусів КТ при фіксованому $b = 40 \text{ \AA}$.

Якщо шар SiO₂ є малим ($a \rightarrow b$), то енергетичні рівні дірки прямують до відповідних рівнів одношарової кремнієвої КТ з нескінченним потенціалом на межі. У цьому випадку поляризаційні заряди, що виникають на першій (Si–SiO₂) і другій (SiO₂/вакуум) гетеромежі, роблять незначний внесок в енергію внаслідок то-

го, що розміри КТ великі. Зменшення внутрішнього радіуса КТ збільшує просторове обмеження й підсилює дію потенціалу самої першої гетерогежі, тому енергія системи зростає. Подальше зменшення внутрішнього радіуса КТ ($a < 9 \text{ \AA}$) спричиняє проникання електрона в шар SiO_2 , вплив першої гетерогежі зменшується і може бути дуже малим, а енергетичні рівні стають такими ж, як в одношаровій SiO_2 КТ, які збільшені на величини U_0 і відповідний вплив поляризаційних зарядів.

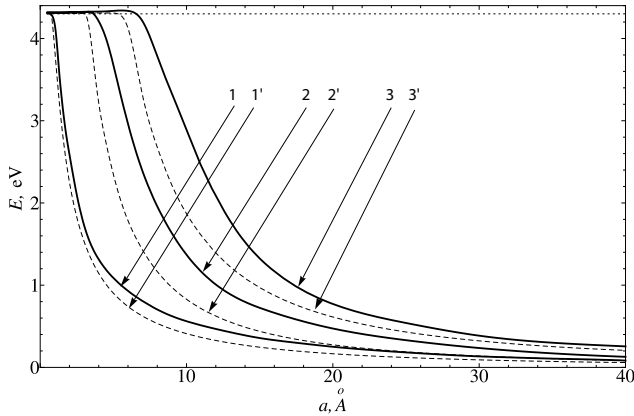


Рис. 2. Залежність енергії основного та збуджених станів дірки від внутрішнього радіуса КТ, що визначена з урахуванням (суцільні криві) та без урахування (штриховані криві) поляризаційних зарядів. Пунктирною прямою позначено висоту потенціального бар'єра в оксиді кремнію. Криві 1, 1' — енергії стану $\psi_{1,1,M}^{0,2}$; криві 2, 2' — енергії стану $\psi_{1,1,M}^1$; 3, 3' — енергії стану $\psi_{1,0,0}^1$.

Для того, щоб провести повний аналіз діркового спектра у двошаровій КТ, на рис. 3 подано графіки залежності енергії дірки від зовнішнього радіуса КТ (шару оксиду кремнію) при фіксованому внутрішньому радіусі $a = 15 \text{ \AA}$.

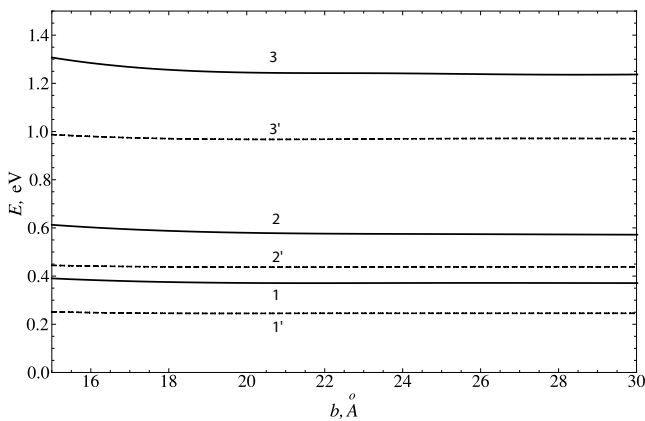


Рис. 3. Залежність енергії основного та збуджених станів дірки від зовнішнього радіуса КТ, що визначена з урахуванням (суцільні криві) та без урахування (штриховані криві) поляризаційних зарядів. Криві 1, 1' — енергії стану $\psi_{1,1,M}^{0,2}$; криві 2, 2' — енергії стану $\psi_{1,1,M}^1$; 3, 3' — енергії стану $\psi_{1,0,0}^1$.

Із графіка видно, що для великих зовнішніх радіусів КТ енергія дірки відповідає енергії дірки в одношаровій Si/SiO_2 КТ. Зменшення зовнішнього радіуса посилює вплив другої гетерогежі, яка збільшує просторове обмеження, що спричиняє незначне зростання енергії дірки. Таке невелике зростання зумовлено тим, що основний вплив чинить перша гетерогежа, розміри якої фіксовані.

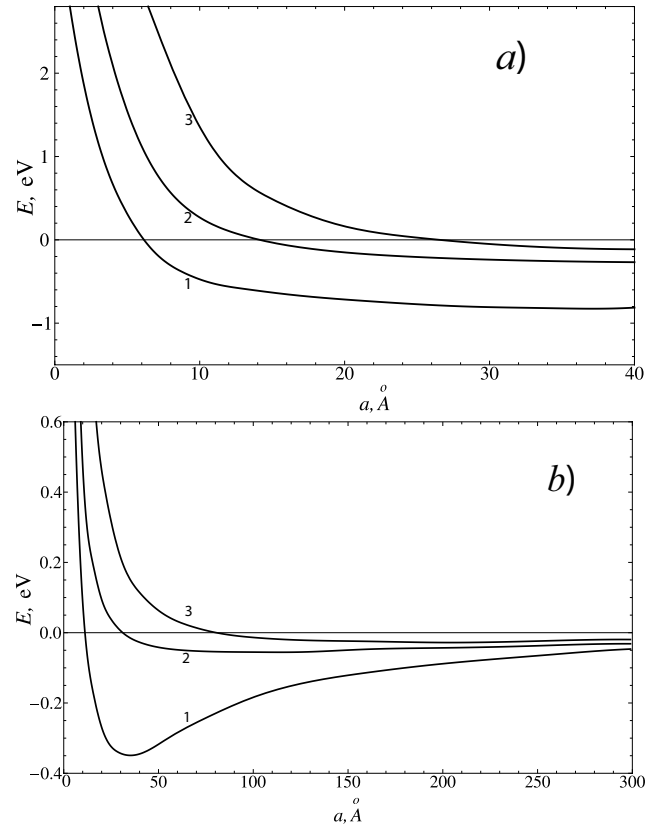


Рис. 4. Залежність енергії основного та збуджених станів акцепторної домішки від внутрішнього радіуса КТ при фіксованому зовнішньому: $b = 40 \text{ \AA}$ (a), $b = 300 \text{ \AA}$ (b). Крива 1 — енергія стану $\psi_{1,1,M}^{0,2}$; крива 2 — енергія стану $\psi_{1,1,M}^1$; 3 — енергія стану $\psi_{1,0,0}^1$.

Наявність акцепторної домішки приведе як до якісної, так до кількісної зміни залежності енергії дірки у двошаровій КТ. На рис. 4 зображено графіки залежності енергії акцепторної домішки від внутрішнього радіуса КТ при різних фіксованих зовнішніх. В обох випадках, якщо внутрішній радіус КТ стає близьким до зовнішнього, то одержуємо енергію акцептора такою, як в одношаровій кремнієвій КТ розміром b . Однак коли зовнішній радіус КТ великий $b > 300 \text{ \AA}$, а внутрішній радіус близький до зовнішнього, то енергія акцептора прямуватиме до відповідної енергії в масивному кристалі кремнію. Зі зменшенням внутрішнього радіуса КТ ($b = 300 \text{ \AA}$), внаслідок зростання глибини ефективних потенціальних ям $U^*(a, b)$, $U^*(b)$, енергія домішки зменшується. Якщо внутрішній радіус КТ стає $a < 45 \text{ \AA}$, то збільшення ефективних потенціальних ям компенсується зростанням

просторового обмеження та потенціалу самодії, що веде до зростання енергії дірки акцепторної домішки. Якісно іншу ситуацію спостерігаємо, коли зовнішній радіус малий $b = 40 \text{ \AA}$. У цьому випадку зменшення внутрішнього радіуса КТ спричиняє лише зростання енергії, бо швидкість більшення ефективних потенціалних ям вже менша, ніж зростання обмеження й потенціалу самодії. Отримуємо монотонне зростання енергії системи.

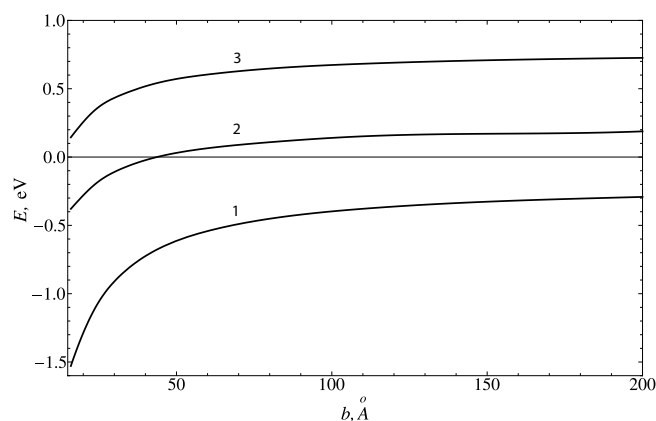


Рис. 5. Енергія акцепторної домішки як функція зовнішнього радіуса КТ. Внутрішній радіус КТ $a = 15 \text{ \AA}$. Крива 1 — енергія стану $\psi_{1,1,M}^{0,2}$; крива 2 — енергія стану $\psi_{1,1,M}^1$; 3 — енергія стану $\psi_{1,0,0}^1$.

У статті також обчислено залежність енергії ак-

цепторної домішки від зовнішнього радіуса КТ для фіксованого внутрішнього радіуса $a = 15 \text{ \AA}$ (рис. 5). Із рисунка видно, що для великих зовнішніх радіусів КТ друга гетерогема не чинить сильного впливу на спектр дірки. Енергія домішки прямує до відповідної енергії в одношаровій Si/SiO₂ КТ.

Зменшення зовнішнього радіуса КТ (при сталому внутрішньому) веде до зменшення енергії акцепторної домішки. Це зменшення пов'язано зі збільшенням глибини ефективної потенціальної ями $U^*(b)$. Якщо $b \rightarrow a$, то енергія дірки акцепторної домішки наближатиметься до відповідної енергії домішки в SiO₂/вакуум КТ з радіусом $a = 15 \text{ \AA}$.

IV. ВИСНОВКИ

Отже, у запропонованій праці на основі *kr*-гамільтоніана 3×3 одержано радіальні рівняння для дірки у сферичній двошаровій КТ, знайдено точні розв'язки відповідних рівнянь, досліджено вплив поляризаційних зарядів двох гетерогеж на енергетичні спектри дірки. А для акцепторної домішки знайдено точні розв'язки рівнянь для двох типів станів, що описуються одним диференціальним рівнянням. Матричне радіальне диференціальне рівняння для акцепторної домішки розв'язано наближено з використанням точних розв'язків задачі без домішки. Одержано залежності енергії акцепторної домішки від зовнішнього та внутрішнього радіусів КТ.

- [1] D. Schooss, A. Mews, A. Eychemuller, H. Weller, Phys. Rev. B **49**, 17072 (1994).
- [2] A. Mews, A. V. Kadavanich, U. Banin, A. P. Alivasatos, Phys. Rev. B **53**, R13242 (1996).
- [3] B. O. Dabbousi *et al.*, J. Phys. Chem. **101**, 9463 (1997).
- [4] Н. В. Ткач, Ю. А. Сети, Физ. техн. полупр. **40**, 1111 (2006).
- [5] М. В. Ткач, О. М. Войцехівська, В. А. Головацький, О. М. Маханець, А. М. Гришук, Журн. фіз. досл. **10**, 315 (2006).
- [6] J. M. Luttinger, W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).
- [7] J. M. Luttinger, Phys. Rev. **102**, 1030 (1956).
- [8] E. Menéndez-Proupin, C. Trallero-Giner, Phys. Rev. B **69**, 125336 (2004).
- [9] Г. Б. Григорян, Э. М. Казарян, А. Л. Эфрос, Т. В. Язева, Физ. тверд. тела **32**, 1772 (1990).
- [10] E. P. Pokatilov, V. A. Fonoberov, V. M. Fomin, J. T. Devreese, Phys. Rev. B **64**, 245328 (2001).
- [11] A. S. Moskalenko *et al.*, Phys. Rev. B **76**, 085427 (2007).
- [12] E. P. Pokatilov, V. A. Fonoberov, V. M. Fomin, J. T. Devreese, Phys. Rev. B **64**, 245329(7) (2001).
- [13] Chun-Ching Yang, Li-Chi Liu, Shih-Hsin Chang, Phys. Rev. B **58**, 1954 (1998).
- [14] М. В. Ткач, В. А. Головацький, Я. М. Березовський, Физ. хім. тверд. тіла **4**, 213 (2003).
- [15] V. I. Boichuk, I. V. Bilynskiy, R. Ya. Leshko, Ukr. J. Phys. **53**, 991 (2008).
- [16] Cheng-Ying Hsieh, Chin. J. Phys. **38**, 478 (2000).
- [17] A. Baldereshi, Nunzio O. Lipari, Phys. Rev. B **8**, 2697 (1973).
- [18] Б. Л. Гельмонт, М. И. Дьяконов, Физ. техн. полупр. **5**, 2191 (1971).
- [19] В. И. Бойчук, Р. Ю. Кубай, Физ. тверд. тела **43**, 226 (2001).
- [20] В. І. Бойчук, Р. Ю. Кубай, Г. М. Годованець, І. С. Шевчук, Журн. фіз. досл. **10**, 220 (2006).
- [21] V. I. Boichuk, I. V. Bilynskiy, R. Ya. Leshko, Condens. Matter Phys. **11**, 653 (2008).
- [22] И. М. Купчак *и др.*, Физ. тхен. полупр. **40**, 98 (2006).
- [23] Б. И. Шкловский, А. Л. Эрос, *Электронные свойства легированных полупроводников* (Наука, Москва, 1979).
- [24] В. Н. Абакумов, В. И. Перель, И. Н. Ясиевич, *Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках* (Издво "Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова РАН", Санкт-Петербург, 1997).
- [25] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of mathematical function with formulas, graphs, and mathematical tables* (Natl. Bur. Stand. Appl. Math. Series No. 55 U. S. GPO, Washington, D.C., 1964).

HOLE AND ACCEPTOR SPECTRA IN A TWO-LAYER SPHERICAL QUANTUM DOT

V. I. Boichuk, I. V. Bilynskyi, R. Ya. Leshko
*Department of Theoretical Physics,
Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University,
3 Stryiska St., 82100, Drohobych, e-mail: leshkoroman@mail.ru*

For a two-layer spherical Si/SiO₂/vacuum nanoheterostructure by neglecting the corrugation of constant-energy surfaces in k -space on the basis of 3×3 Hamiltonian the energy of discrete hole states and hydrogenic acceptor impurity were calculated as a function of the quantum dot sizes. Exact solutions of all radial equation for a hole without an impurity and two equations with an impurity were derived. The matrix radial equation of a hole of the acceptor impurity was solved by approximate methods of quantum mechanics. The dependence of the energy spectrum on the polarization charges, which arise at the separation boundary of the media, was defined. The range of quantum dot sizes where the heteroboundary make the substantial effect was defined.