

ЕНЕРГІЇ ТА ХВИЛЬОВІ ФУНКЦІЇ ЕЛЕКТРОНА У СФЕРИЧНІЙ КВАНТОВІЙ ТОЧЦІ CdS/SiO₂ З ОДНІЄЮ ТА ДВОМА ВОДНЕПОДІБНИМИ ДОМІШКАМИ

В. А. Головацький, І. Б. Франків

*Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича
вул. Коцюбинського, 2, 58012, Чернівці, Україна*

(Отримано 09 вересня 2011 р.; в остаточному вигляді — 25 травня 2012 р.)

Різними теоретичними методами в наближенні ефективної маси вивчено спектр і хвильові функції електрона у сферичній квантовій точці (КТ) з воднеподібною донорною домішкою. Дослідження виконано для центральної, нецентральної та зовнішньої домішок. Оцінено точності енергій та хвильових функцій, отриманих варіаційним методом, а також результатів досліджень, одержаних у межах теорії збурень для домішки, розміщеної зовні КТ. Показано збіжність результатів варіаційного методу з точними розв'язками рівняння Шредингера для центральної домішки та результатами теорії збурень для зовнішньої домішки.

На основі точних розв'язків рівняння Шредингера для центральної домішки варіаційним методом та методом теорії збурень розраховано енергію основного стану електрона в КТ з двома донорними домішками. Показано, що локалізація електрона відбувається в околі центральної домішки, а у граничному випадку, коли обидві домішки перебувають у центрі квантової точки, енергія основного стану електрона збігається з відомим результатом для двічі йонізованої домішки.

Ключові слова: квантова точка, донорна домішка.

PACS number(s): 73.21.La, 73.20.Nb, 78.67.Nc

ВСТУП

Перехід від лабораторних досліджень до практичного використання квантових точок (КТ) у сучасних напівпровідникових приладах стимулює теоретичні та експериментальні дослідження з метою вдосконалення їхніх характеристик. Дослідники приділяють значну увагу колоїдним методам вирощування квантових точок, тому що це найдешевші технології отримання близьких до сферичних наносистем із різних напівпровідникових матеріалів. Колоїдними методами одержують складні сферичні багатопарові наносистеми, які застосовують у біології й медицині як світловишпромінювальні мітки та сенсори, в оптоелектроніці й енергетиці як джерела випромінювання та елементи сонячних батарей.

Наявність домішок у наноструктурах суттєво впливає на їхні оптичні, електричні й магнітні властивості й змінює фізичні характеристики створених на їхній основі приладів. Домішки у квантових точках можуть цілеспрямовано використовувати для поліпшення характеристик напівпровідникових приладів, а також можуть зменшувати їхню ефективність. Тому вивчення ролі заряджених домішок у формуванні оптичних властивостей наноструктур усе ще актуальне завдання як теоретичних, так і експериментальних досліджень. Велику кількість таких робіт виконано в останні десять років. Найбільше теоретичних праць присвячено вивченню впливу центральної мілкої домішки на енергії основного та збуджених станів сферичних квантових точок, виконаних методом ефек-

тивних мас у межах моделей прямокутної [1–5] чи параболічної [6] квантових ям. У наближенні ефективних мас така задача має точні розв'язки рівняння Шредингера, що дало змогу розрахувати вплив домішки на енергії та сили осциляторів квантових переходів квазічастинок [7–8], а також урахувати вплив зовнішніх електричного та магнітного полів на енергію зв'язку електрона домішкою, розміщеною в центрі КТ [9–10].

Експериментально встановлено, що заряджені домішки в колоїдних квантових точках мають властивість розташовуватися біля поверхні нанокристала. Заряджені домішки також можуть бути в бар'єрному шарі матеріалу, що оточує квантову точку, оскільки для збільшення концентрації вільних носіїв заряду часто легують бар'єрний шар, з якого носії заряду потрапляють у потенціальну яму, залишаючись під впливом кулонівського потенціалу зарядженої домішки. У такому випадку домішки перебувають за межами квантових точок, але їхній вплив на оптичні властивості наносистеми може бути суттєвим. Крім цього, однією з перспективних галузей застосування квантових точок, отриманих у колоїдних розчинах, є біологія й медицина. Колоїдні квантові точки можуть бути чутливими сенсорами біохімічних реакцій, що супроводжуються утворенням локальних зарядів. Такі заряди можна виявляти за зміною енергії чи інтенсивності в спектрах люмінесценції квантових точок [11].

А що точного розв'язку задачі про енергетичний спектр квазічастинок у квантових точках у полі нецентральної домішки навіть у межах найпростіших

моделей немає, то теоретичні дослідження виконуються методами теорії збурень і різними варіаційними методами [12–15]. Основним результатом таких досліджень було отримання залежності енергії зв'язку квазічастинки з донорною чи акцепторною домішкою від її положення у квантовій точці. На сьогодні усе ще мало досліджений вплив зовнішніх домішок на енергетичний спектр та розподіл густини ймовірності перебування електрона в наносистемі. У межах моделі параболічної потенціальної ями взагалі відсутня можливість такого розгляду, тому що неможливо задати геометричні розміри КТ і висоту потенціального бар'єра. Не виконувалось порівняння різних наближених методів між собою, щоб визначити допустимі сфери їх застосування. Для цього необхідно виконати розрахунки різними методами з однаковими параметрами наносистеми. Для випадку, коли квантова точка містить декілька домішок, важливо визначити міру впливу на оптичні властивості наносистеми кожної з них.

У цій роботі досліджено енергії та хвильові функції основного стану електрона в КТ CdS/SiO₂ з однією та двома донорними домішками різними методами для різних розмірів КТ та положень домішок. Виконано порівняння результатів, отриманих точним, варіаційним та двома методами теорій збурень, яке дає змогу оцінити точність і межі застосування цих наближених методів. Побудовано розподіли густини ймовірності перебування квазічастинки у наносистемах, які дають змогу пояснити залежності їхніх енергій від положення домішок.

І. РІВНЯННЯ ШРЕДИНГЕРА ТА ЙОГО РОЗВ'ЯЗКИ ДЛЯ ЕЛЕКТРОНА У СФЕРИЧНІЙ КТ З ДОНОРНОЮ ДОМІШКОЮ

Розгляньмо сферичну квантову точку (середовище 0), поміщену в напівпровідникову матрицю (середовище 1). На відстані r_0 від центра КТ перебуває донорна домішка. Систему координат виберімо так, щоб її початок збігався з центром КТ, а вісь Oz проходила через положення домішки. За початок відліку енергії виберемо положення дна зони провідності напівпровідникового матеріалу квантової точки. Рівняння Шредингера матиме вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{\mu(r)} \nabla \Psi_{nlm}(\mathbf{r}) + \left[U(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} \right] \Psi_{nlm}(\mathbf{r}) = E_{nl}^+ \Psi_{nlm}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

де

$$\mu(\mathbf{r}) = \begin{cases} m_0, & r \leq R, \\ m_1, & r > R, \end{cases} \quad U(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, & r \leq R, \\ V_0, & r > R. \end{cases} \quad (2)$$

Величина ε у загальному випадку є функцією координат електрона, домішки та радіуса КТ і відіграє роль ефективної діелектричної проникності, що враховує особливості кулонівської взаємодії в неоднорідному діелектричному середовищі. Аналітичний вигляд цієї функції складний, його можна отримати з розв'язку рівняння Пуассона [4]. Із фізичних міркувань зрозуміло, що значення ε перебуває між величинами діелектричних проникностей напівпровідникових матеріалів квантової точки ε_0 та матриці ε_1 і ближче до значення діелектричної проникності того матеріалу, який більшою мірою екранує взаємодію між електроном та домішкою. У випадку невеликої відмінності між ε_0 і ε_1 , для великих КТ при $r_0 < R$, у рівнянні Шредингера (1) можна покласти $\varepsilon \approx \varepsilon_0$, якщо ж домішка є далеко за межами КТ, то значення ε наближається до ε_1 .

А. Донорна домішка розміщена в центрі КТ

Якщо $r_0 = 0$, то розв'язуючи рівняння Шредингера (1), у сферичних координатах отримуємо рівняння для радіальної частини хвильової функції

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R_{nl}(r) + \left(E_{nl}^+ + \frac{e^2}{\varepsilon r} \right) R_{nl}(r) = 0, \quad r \leq R \quad (3)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_1} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R_{nl}(r) + \left(E_{nl}^+ - V_0 + \frac{e^2}{\varepsilon r} \right) R_{nl}(r) = 0, \quad r > R. \quad (4)$$

Використовуючи позначення

$$\xi_0 = \frac{\sqrt{8m_0(-E_{nl}^+)}}{\hbar}, \quad \eta_0 = \pm \frac{2m_0 e^2}{\varepsilon \xi_0 \hbar^2},$$

$$\xi_1 = \frac{\sqrt{8m_1(V_0 - E_{nl}^+)}}{\hbar}, \quad \eta_1 = \frac{2m_1 e^2}{\varepsilon \xi_1 \hbar^2} \quad (5)$$

(знак “+” для $E_{nl}^+ > 0$, знак “–” для $E_{nl}^+ < 0$).

Розв'язки диференціальних рівнянь (3) і (4) матимуть вигляд

$$R_{nl}(r) = \begin{cases} A_0 \exp[-\xi_0 r/2] r^\ell F(\ell+1-\eta_0, 2\ell+2, \xi_0 r), & r \leq R, \\ A_1 \exp[-\xi_1 r/2] r^\ell G(\ell+1-\eta_1, 2\ell+2, \xi_1 r), & r > R, \end{cases} \quad (6)$$

де функції $F(a, b, z)$ та $G(a, b, z)$ – вироджені гіпергеометричні функції першого та другого роду.

Дискретний енергетичний спектр електрона у сферичній КТ з центральною донорною домішкою отримуємо з граничної умови

$$\frac{1}{m_0} \frac{\partial \ln(R_{n\ell}^{(0)}(r))}{\partial r} \Big|_{r=R} = \frac{1}{m_1} \frac{\partial \ln(R_{n\ell}^{(1)}(r))}{\partial r} \Big|_{r=R}, \quad (7)$$

а коефіцієнти A_0 і A_1 — з умов зшивання хвильових функцій

$$R_{n\ell}^{(0)}(r) \Big|_{r=R} = R_{n\ell}^{(1)}(r) \Big|_{r=R} \quad (8)$$

та умови нормування

$$\int_0^R |R_{n\ell}^{(0)}(r)|^2 r^2 dr + \int_R^\infty |R_{n\ell}^{(1)}(r)|^2 r^2 dr = 1. \quad (9)$$

В. Донорна домішка розміщена в точці \mathbf{r}_0 (варіаційний метод)

Для основного стану (1s) варіаційну функцію вибираємо у вигляді добутку хвильової функції основного стану електрона у сферичній КТ без домішки та множника $e^{-\lambda|r-\mathbf{r}_0|}$, що описує кулонівську взаємодію електрона з донорною домішкою

$$\Psi_{10}^{\text{var}}(\mathbf{r}) = \begin{cases} A \frac{\sin(k_{10} r)}{r} \exp\left[-\lambda\sqrt{r^2 + r_0^2 - 2rr_0 \cos\theta}\right], & r \leq R, \\ B \frac{\exp(-\chi_{10} r)}{r} \exp\left[-\lambda\sqrt{r^2 + r_0^2 - 2rr_0 \cos\theta}\right], & r > R, \end{cases} \quad (10)$$

де

$$k_{10} = \sqrt{\frac{2m_0 E_{10}}{\hbar}}, \quad \chi_{10} = \sqrt{\frac{2m_1(V_0 - E_{10})}{\hbar}}, \quad (11)$$

E_{10} — енергія основного стану електрона в КТ без домішки, λ — варіаційний параметр. Коефіцієнти A і B обчислюємо з умов нормування та неперервності хвильової функції при $r = R$.

Енергію основного стану в КТ з домішкою знаходимо з мінімуму функціонала

$$E_{10}^{\text{var}} = \min_{\lambda} \iiint \psi_{10}^{\text{var}*}(\mathbf{r}) H \psi_{10}^{\text{var}}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}. \quad (12)$$

Якщо $r_0 = 0$, то інтеграли, що входять у (12), розраховуємо аналітично

$$E_{10}^{\text{var}} = A^2 \min_{\lambda} [\langle T_0 \rangle + \langle T_1 \rangle + \langle U_0 \rangle + \langle U_1 \rangle], \quad (13)$$

де

$$\langle T_0 \rangle = \frac{\pi \hbar^2 e^{-2R\lambda}}{2m_0} \times [\lambda \sin^2(k_{10}R) - k_{10} \sin(2k_{10}R) - (1 - e^{2R\lambda})k_{10}^2],$$

$$\langle T_1 \rangle = -\frac{\pi \hbar^2 e^{-2R\lambda}}{m_1} (\chi_{10} + \lambda) \sin^2(k_{10}R),$$

$$\langle U_0 \rangle = -\frac{\pi e^2}{\varepsilon} \times \left[\ln\left(\frac{k_{10}^2}{\lambda^2} + 1\right) + 2 \int_R^\infty \frac{\exp(-2\lambda r)(1 - \cos(2k_{10}r))}{r} dr \right],$$

$$\langle U_1 \rangle = \sin^2(k_{10}R) \exp(2\chi_{10}R) \times \left\{ \frac{V_0}{\chi_{10} + \lambda} - \frac{4\pi e^2}{\varepsilon} \text{Ei}[-2(\chi_{10} + \lambda)R] \right\},$$

$$\text{Ei}(z) = \int_1^\infty \frac{e^{zt}}{t} dt,$$

а константу нормування визначаємо виразом

$$A = \frac{e^{\lambda R}}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2 \sin^2(k_{10}R)}{\chi_{10} + \lambda} - \frac{k_{10}^2(1 - e^{2\lambda R}) + 2\lambda^2 \sin^2(k_{10}R) + k_{10}\lambda \sin(2k_{10}R)}{\lambda(k_{10}^2 + \lambda^2)} \right)^{-1/2}. \quad (14)$$

Якщо $r_0 \neq 0$ (нецентральна домішка), то у виразі (12) вдається виконати інтегрування лише за кутовими змінними. Отриманого виразу не наводимо через його громіздкість.

С. Донорна домішка розміщена в точці \mathbf{r}_0 (метод теорії збурень)

Залежно від співвідношення між r_0 та R можна в різний спосіб розділити гамільтоніан на основну частину та збурення.

При великих значеннях r_0 кулонівська взаємодія є малою порівняно з потенціалом розмірного квантування, тому кулонівський доданок в (1) можна розглядати як збурення до основного гамільтоніана

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{\mu(r)} \nabla + U(\mathbf{r}), \quad (15)$$

який описує електрон у квантовій точці без домішки. Енергетичний спектр електрона в КТ з нецентральною домішкою визначатимемо формулою $E_{nlm}^{\text{pert1}} =$

$E_{nlm} + \Delta E_{nlm}$, де поправки в першому наближенні теорії збурень, розраховані на хвильових функціях електрона в КТ без домішки, матимуть вигляд

$$\Delta E_{nlm} = - \left\langle n\ell m^* \left| \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} \right| n\ell m \right\rangle. \quad (16)$$

Використовуючи розклад

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \frac{4\pi}{2\ell+1} \frac{[\min(r, r_0)]^\ell}{[\max(r, r_0)]^{\ell+1}} Y_{\ell m}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell m}(\theta_0, \varphi_0) \quad (17)$$

для основного стану електрона отримуємо

$$|\Delta E_{100}| = \frac{e^2 N^2}{\varepsilon} \left[\int_0^R \sin^2(k_{10} r) \frac{1}{\max(r, r_0)} dr + \int_R^\infty \exp[2\chi_{10}(R-r)] \frac{\sin^2(k_{10} R)}{\max(r, r_0)} dr \right], \quad (18)$$

де

$$N = 2 \left[2R + 2 \sin^2(k_{10} r) / \chi_{10} - \sin(2k_{10} r) / k_{10} \right]^{-1/2}, \quad (19)$$

а величини k_{10} та χ_{10} визначаємо з (11).

Якщо $r_0 \ll R$, то в основний гамільтоніан включимо потенціальну енергію кулонівської взаємодії з центральною домішкою,

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{\mu(r)} \nabla + U(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{\varepsilon r}. \quad (20)$$

Потенціал збурення матиме вигляд

$$V = \frac{e^2}{\varepsilon r} - \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}. \quad (21)$$

Енергетичний спектр електрона в КТ з нецентральною домішкою в першому наближенні теорії збурень визначатимемо формулою $E_{nlm}^{\text{pert2}} = E_{n\ell}^+ + \Delta E_{nlm}^0 + \Delta E_{nlm}$, де

$$\Delta E_{nlm}^0 = \left\langle \Psi_{nlm}^* \left| \frac{e^2}{\varepsilon r} \right| \Psi_{nlm} \right\rangle. \quad (22)$$

II. РЕЗУЛЬТАТИ ЧИСЛОВИХ РОЗРАХУНКІВ ЕНЕРГІЙ І ХВИЛЬОВИХ ФУНКЦІЙ ОСНОВНОГО СТАНУ ЕЛЕКТРОНА В КТ CdS/SiO₂ З ДОНОРНОЮ ДОМІШКОЮ

Числові розрахунки виконували з параметрами сферичної наносистеми CdS/SiO₂: $m_0 = 0.2 m_e$, $m_1 = 0.42 m_e$ — ефективні маси електрона в кристалі CdS та SiO₂ відповідно, m_e — маса вільного електрона, $a_{\text{CdS}} = 5.818 \text{ \AA}$ — стала ґратки, $\varepsilon_0 = 5.5$, $\varepsilon_1 = 4.9$ —

діелектричні сталі нанорозмірного матеріалу CdS та матриці SiO₂ відповідно. Зміщення зон провідності на межі поділу середовищ $V_0 = 2.7 \text{ eV}$.

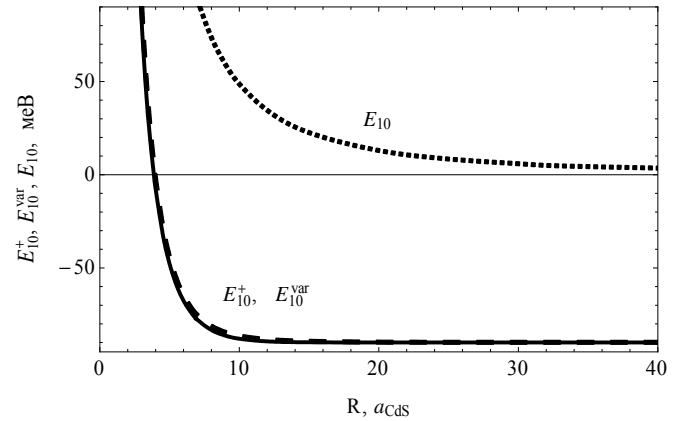


Рис. 1. Залежність енергії основного стану електрона від радіуса КТ CdS/SiO₂: E_{10}^+ — точний розв'язок (суцільна лінія); E_{10}^{var} — варіаційний метод при $r_0 = 0$ (штрихова лінія); E_{10} — без домішки.

Результати числових розрахунків енергії основного стану електрона у сферичній КТ CdS/SiO₂ з центральною домішкою, виконаних варіаційним методом та на основі точних розв'язків рівняння Шрединґера, наведено на рис. 1. З нього видно, що результати варіаційного методу практично збігаються з точними розв'язками рівняння Шрединґера. Оцінити точність варіаційного методу можна на основі числових даних, наведених у таблиці 1. З отриманих числових

даних видно, що точність варіаційного методу зростає зі збільшенням радіуса квантової точки. Варіаційний параметр визначає характерний радіус локалізації електрона домішкою $a = 1/(2\lambda)$. Як видно з таблиці 1, у випадку $R > a$, розмірне квантування стає слабшим за кулонівську взаємодію й енергія основного стану електрона не залежить від радіуса КТ. Подібний висновок впливає і з аналізу рис. 2, де наведено

розподіл радіальної ймовірності перебування електрона в наносистемі при різних розмірах КТ. З рисунка видно, що наявність домішки суттєво впливає на найбільш імовірне положення електрона, особливо це проявляється для квантових точок, радіус яких більший за радіус локалізації домішкою. Зміни в розподілі ймовірності перебування квазічастинки впливають на сили осциляторів квантових переходів [7].

R, a_{Cds}	$E_{10}^+, \text{ меВ}$	$E_{10}^{\text{var}}, \text{ меВ}$	$E_{10}^{\text{var}} - E_{10}^+$	$a = \frac{1}{2\lambda}, a_{\text{Cds}}$	$E_{10}, \text{ меВ}$
3	81.50	90.45	8.95	28.3	401.82
4	-7.78	-2.60	5.18	24.8	250.59
5	-47.86	-44.23	3.63	23.0	170.88
8	-83.31	-81.22	2.09	19.5	73.55
10	-87.97	-86.46	1.51	17.8	48.64
15	-89.87	-89.34	0.53	15.7	22.58
20	-89.95	-89.77	0.18	14.8	12.99
25	-89.95	-89.88	0.07	14.5	8.42
30	-89.950	-89.916	0.034	14.2	5.90
35	-89.950	-89.932	0.018	14.1	4.36
50	-89.950	-89.946	0.004	13.9	2.16

Таблиця 1. Результати числових розрахунків енергій E_{10}^+ (точний розв'язок), E_{10}^{var} (варіаційний метод) та E_{10} (КТ без домішки).

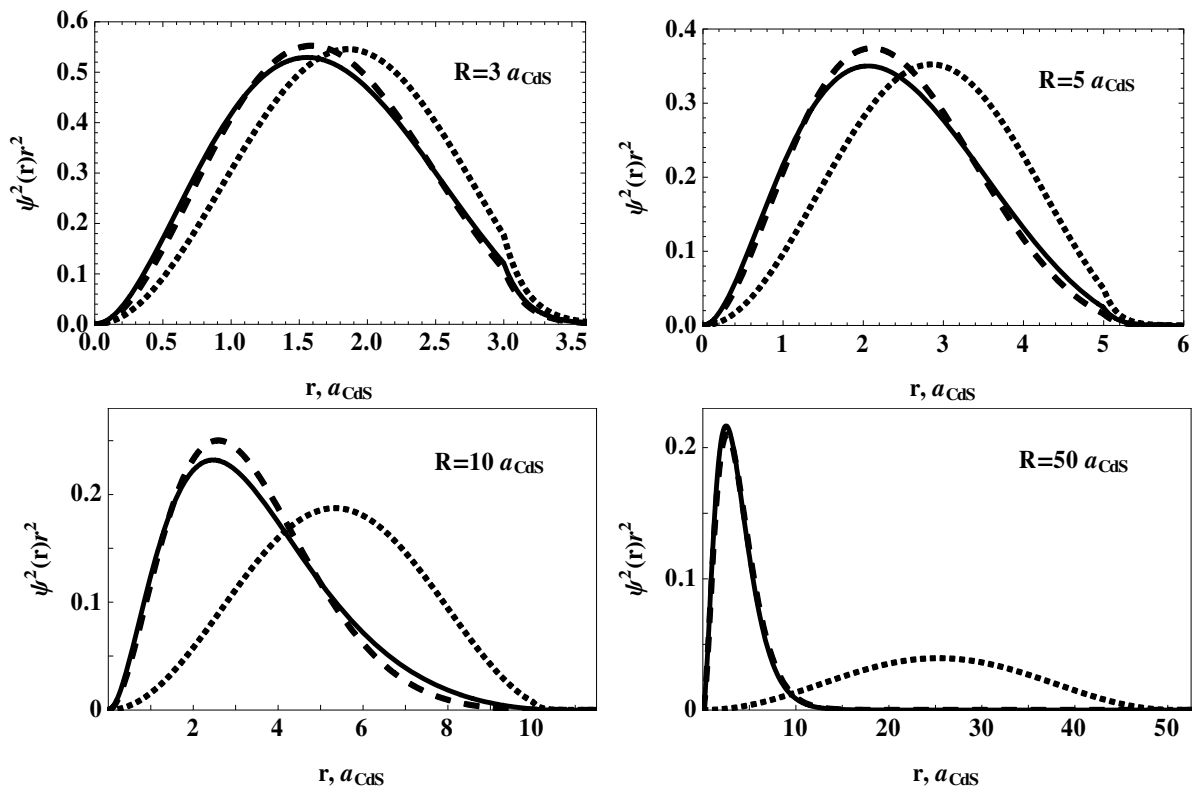


Рис. 2. Розподіл радіальної ймовірності перебування електрона в наносистемі: точний розв'язок — суцільна лінія; варіаційний метод при $r_0 = 0$ — штрихова лінія; квантова точка без домішки — точкова лінія.

Якщо $r_0 \neq 0$, то числові розрахунки виконувалися варіаційним методом та методом теорії збурень. Залежність енергії основного стану електрона в КТ CdS/SiO₂ від положення домішки наведено на рис. 3, з якого видно, що максимальний зсув основного рівня електрона відбувається внаслідок його взаємодії з донорною домішкою, поміщеною в центрі КТ. Із віддаленням домішки від центра КТ енергія взаємодії електрона з домішкою зменшується.

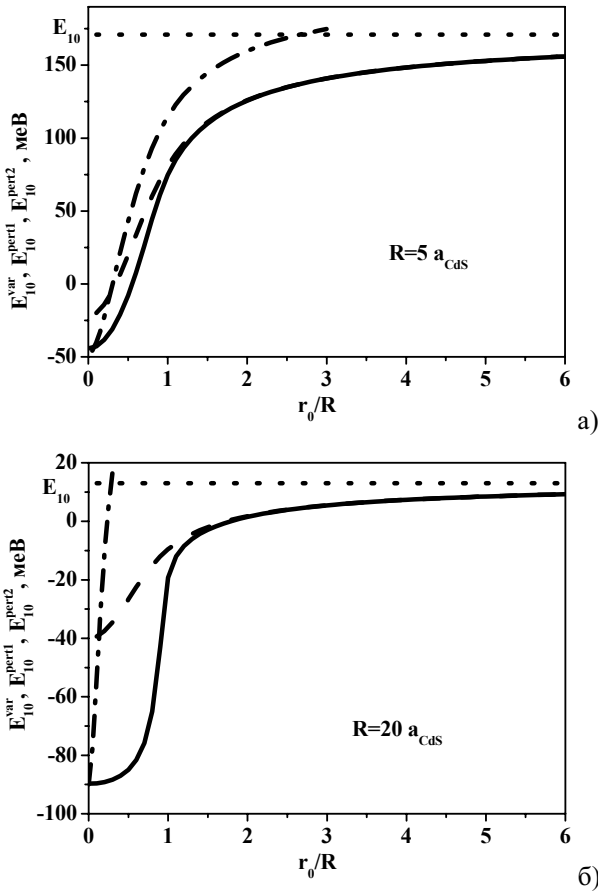


Рис. 3. Залежність енергії основного стану електрона в КТ CdS/SiO₂ від положення донорної домішки: варіаційний метод — суцільна лінія; $E_{100}^{\text{pert}1}$ — штрихова лінія; $E_{100}^{\text{pert}2}$ — штрих-пунктирна лінія; без домішки — точкова лінія. а) $R = 5 a_{\text{CdS}}$, б) $R = 20 a_{\text{CdS}}$.

Якщо домішка розміщена ззовні КТ, то енергія $E_{100}^{\text{pert}1}$, розрахована методом теорії збурення, з високою точністю збігаються з результатами варіаційного методу. Така збіжність проявляється тим краще, чим менші розміри квантової точки, оскільки зі зменшенням розмірів КТ зростає потенціальна енергія розмірного квантування і кулонівську взаємодію можна вважати збуренням до основного гамільтоніана.

Енергетичний зсув основного рівня електрона внаслідок кулонівської взаємодії досягає десятків меВ на відстанях декількох радіусів КТ. Причому для квантових точок меншого розміру цей зсув є більшим.

Якщо домішка розміщена в околі центра квантової точки, роль збурення виконує різниця потенціальних енергій взаємодії електрона з центральною та нецент-

ральною домішками (21), яка є малою порівняно з основним гамільтоніаном (20), тому енергія $E_{100}^{\text{pert}2}$ близька до енергій E_{10}^+ та E_{10}^{var} . При $r_0 > 0.1 R$ точність розрахунків у першому порядку теорії збурень різко зменшується, особливо для КТ великих розмірів.

Із рис. 3 також видно, що хоча положення домішки суттєво впливає на положення енергії основного стану електрона, але для квантових точок, радіус яких більший за $a = 1/(2\lambda)$, в околі центра КТ існує область положень домішки, для яких така залежність є дуже слабкою.

Вплив розмірів КТ та положення донорної домішки на локалізацію електрона можна проаналізувати на основі залежності радіуса локалізації електрона домішкою від R (рис. 4). З рис. 4 видно, що залежність радіуса локалізації електрона домішкою від радіуса КТ можна умовно розділити на три області: 1) $R < 3 a_{\text{CdS}}$; 2) $3 a_{\text{CdS}} < R < 15 a_{\text{CdS}}$; 3) $R > 15 a_{\text{CdS}}$. У *першій* області кулонівська взаємодія слабша за енергію розмірного квантування, тому зміна положення домішки в КТ мало впливає на енергію основного стану. У *другій* області кулонівське притягання порівнянне з енергією розмірного квантування. При цьому характерний радіус локалізації електрона домішкою більший за радіус КТ, тому положення домішки суттєво впливає на цю локалізацію. При $r_0 = 0.5 R$ наявність потенціальної стінки сприяє локалізації електрона в області кулонівської ями, що проявляється в меншому радіусі локалізації електрона, ніж у випадку центральної домішки. При $r_0 = 0.9 R$ електрон не може наблизитися до високого потенціального бар'єра, тому він слабо зв'язується домішкою і радіус локалізації в цьому випадку більший, ніж для центральної домішки.

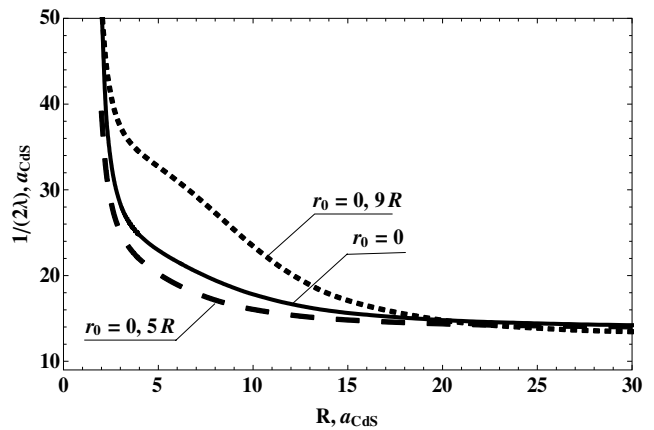


Рис. 4. Залежність радіуса локалізації електрона домішкою від радіуса КТ при $r_0 = 0$ — суцільна лінія, $r_0 = 0.5 R$ — штрихова лінія; $r_0 = 0.9 R$ — точкова лінія.

У *третьій* області розміри квантової точки більші за розмір кулонівської локалізації ($R > a$). Енергія основного стану електрона є так глибоко в кулонівській ямі, що потенціальні стінки квантової точки не впливають на локалізацію електрона домішкою навіть при $r_0 = 0.9 R$. У цьому випадку радіус локалізації не залежить ні від розмірів КТ, ні від положення домішки.

III. ЕНЕРГІЯ ОСНОВНОГО СТАНУ ЕЛЕКТРОНА У СФЕРИЧНІЙ КТ З ДВОМА ДОНОРНИМИ ДОМІШКАМИ

На основі точних розв'язків рівняння Шредингера для електрона у сферичній КТ з центральною донорною домішкою варіаційним методом розрахуємо енергію основного стану електрона в КТ з двома донорними домішками (E_1^{++}).

Якщо одна з домішок є в центрі КТ, гамільтоніан задачі матиме вигляд

$$H = H_0 - \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}, \quad (23)$$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{\mu(r)} \nabla + U(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{\varepsilon r}, \quad (24)$$

де $\mu(\mathbf{r})$ та $U(\mathbf{r})$ задані рівнянням (2).

Варіаційну функцію, що описує взаємодію електрона з двома донорними домішками, отримуємо на основі розв'язків (6) при $\ell = 0$ і вона має вигляд:

$$\Psi_{10}^{var}(r) = \begin{cases} A e^{-\xi_0 r/2} F(1 - \eta_0, 2, \xi_0 r) \exp \left[-\lambda \sqrt{r^2 + r_0^2 - 2rr_0 \cos \theta} \right], & r \leq R, \\ B e^{-\xi_1 r/2} G(1 - \eta_1, 2, \xi_1 r) \exp \left[-\lambda \sqrt{r^2 + r_0^2 - 2rr_0 \cos \theta} \right], & r > R, \end{cases} \quad (25)$$

де λ — варіаційний параметр, коефіцієнти A і B обчислюємо з умов нормування та неперервності хвильової функції при $r = R$. Величини ζ_0 , η_0 , ζ_1 , η_1 визначаємо співвідношеннями (5) через енергію основного стану (E_{10}^+) електрона в КТ з центральною домішкою.

Енергію основного стану електрона в КТ з двома воднеподібними домішками розрахуємо з мінімуму функціонала

$$E_{10}^{++} = \min_{\lambda} \iiint \psi_{10}^{var*}(\mathbf{r}) H \psi_{10}^{var}(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}. \quad (26)$$

Якщо кулонівський доданок взаємодії електрона з нецентральною домішкою розглядати як збурення до основного гамільтоніана (23), то, використовуючи точні хвильові функції (6), за теорією збурень можна визначити поправки до енергії E_{10}^+

$$\Delta E_{10}^{++} = - \left\langle R_{100}^* \left| \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} \right| R_{100} \right\rangle. \quad (27)$$

Результати розрахунків наведено на рис. 5, з якого видно, що енергія основного стану електрона в полі двох домішок, обчислена методом теорії збурень, добре збігається з результатом варіаційного методу при $r_0 > 0.5 R$. Зі зменшенням r_0 енергія E_{10}^{++} зростає за абсолютною величиною. З рис. 5 б) видно, що для квантових точок великих розмірів, у яких кулонівський потенціал переважає потенціал розмірного квантування, при $r_0 = 0$ виконується співвідношення $E_{10}^{++} = 4E_{10}^+$. Це зрозуміло з фізичних міркувань, оскільки дві донорні домішки, що перебувають у центрі КТ рівноцінні двічі йонізованій домішці, для якої відповідне співвідношення випливає з загальної теорії [16].

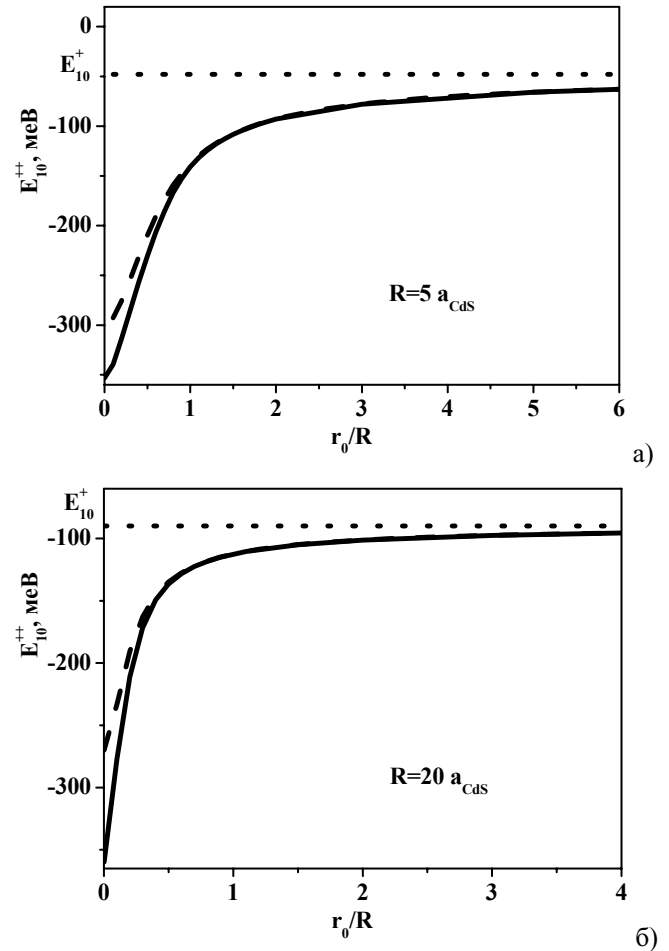


Рис. 5. Залежність енергії основного стану електрона в КТ CdS/SiO₂ з центральною донорною домішкою від положення іншої донорної домішки: варіаційний метод — суцільна лінія; теорія збурень — штрихова лінія; без другої домішки — точкова лінія. а) $R = 5 a_{\text{CdS}}$, б) $R = 20 a_{\text{CdS}}$.

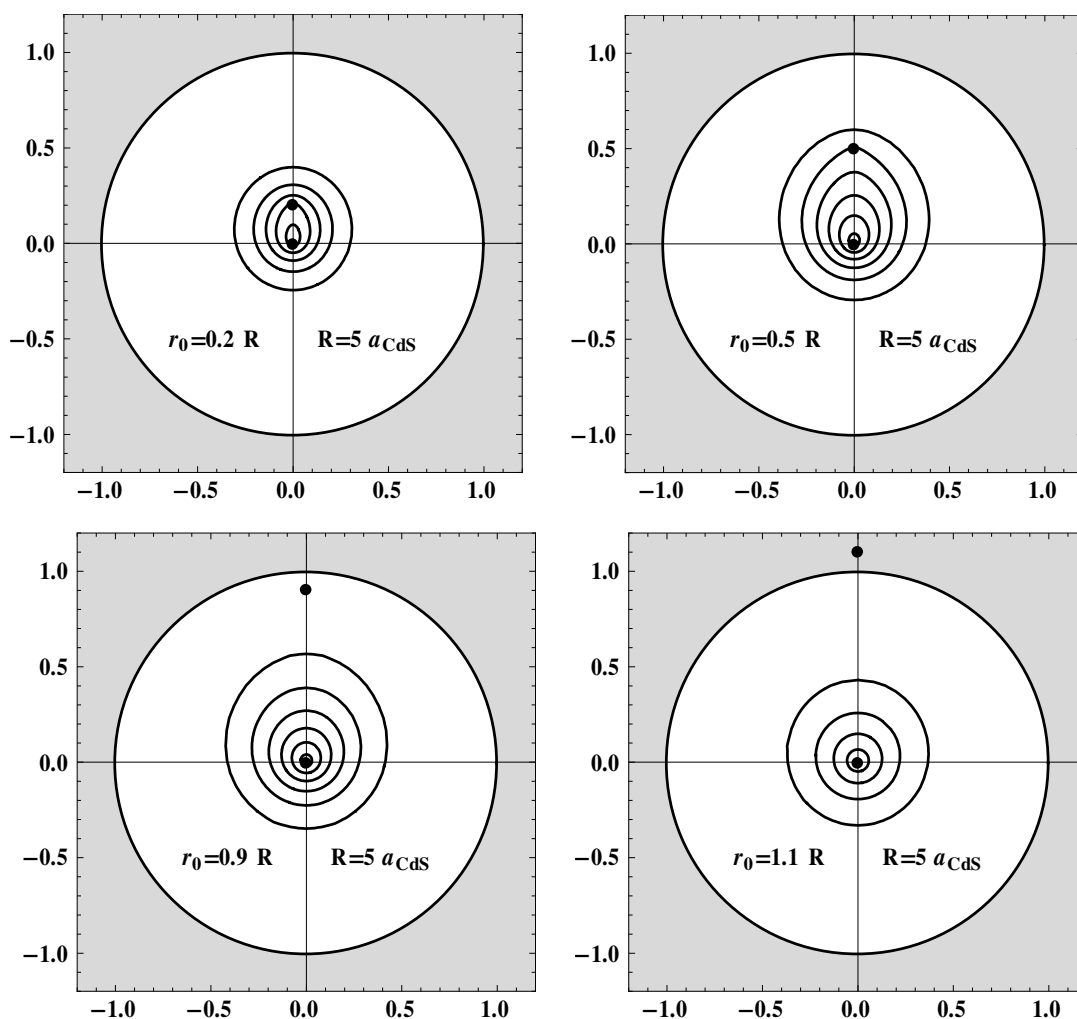


Рис. 6. Розподіл густини ймовірності перебування електрона в КТ CdS/SiO₂ з двома донорними домішками $R = 5, 10, 20 a_{CdS}$, при різних положеннях домішки: $r_0 = 0.2; 0.5; 0.9; 1.1$.

На рис. 6 зображено розподіл густини ймовірності перебування електрона в КТ CdS/SiO₂ з двома донорними домішками при різних значеннях r_0 . Положення домішок позначено точками. З рис. 6 видно, що незалежно від величини r_0 найбільш ймовірним положенням електрона залишається область у центрі КТ. Отже, взаємодія електрона в основному стані з центральною домішкою сильніша за взаємодію з нецентральною, а при $r_0 > 0.5 R$ взаємодію з нецентральною домішкою можна розглядати як збурення.

ВИСНОВКИ

Наявність домішок у квантовій точці CdS/SiO₂ суттєво впливає не тільки на енергетичний спектр електронів, але й на розподіл їхньої густини ймовірності перебування в наносистемі. Зсув енергії основного стану електрона, локалізованого в КТ, внаслідок взаємодії з зовнішньою донорною домішкою досягає десятків меВ навіть на відстані кількох радіусів КТ. Якщо ж

електрон локалізований у КТ з центральною донорною домішкою, то вплив зовнішньої домішки суттєво зменшується. Отже для використання колоїдних квантових точок у якості сенсорів зовнішніх зарядів необхідно забезпечити відсутність заряджених домішок у середині наноструктур.

Енергії і хвильові функції основного стану електрона в КТ з центральною домішкою, отримані варіаційним методом, з великою точністю збігаються з результатом точного розв'язку рівняння Шредингера в широкій області розмірів КТ. Метод теорії збурень дає змогу з задовільною точністю розраховувати зсув енергії основного стану електрона внаслідок кулонівської взаємодії з зовнішнім точковим зарядом. Зменшення розмірів КТ приводить до зростання розмірного квантування і внаслідок цього — до зростання точності та розширення меж застосування методів теорії збурень. У випадку великої концентрації домішок, коли зростає ймовірність близького розміщення двох донорних домішок, глибина залягання домішкових станів зростає.

- [1] C. Hsieh, D. Chuu, J. Phys.: Cond. Matt. **12**, 8641 (2000).
 [2] C. Bose, C. K. Sarkar, Phys. Status Solidi B **218**, 461 (2000).
 [3] М. Ткач, В. Головацький, Я. Березовський, Фіз. хім. тв. тіла **4**, 213 (2003).
 [4] В. Бойчук, І. Білинський, Р. Лешко, Я. Вороняк, Укр. фіз. журн. **54**, 1021 (2009).
 [5] V. Boichuk, I. Bilynsky, R. Leshko, Condens. Matter Phys. **13**, 13702 (2010).
 [6] Chun-Ching Yang, Chin. J. Phys. **39**, 625 (2001).
 [7] V. Holovatsky, O. Makhanets, O. Voitsekhivska, Physica E, **41**, 1522 (2009).
 [8] S. Yilmaz, H. Safak, Physica E, **36**, 40 (2007).
 [9] A. Manaselyan, A. Kirakosyan, Physica E, **22**, 825 (2004).
 [10] E. Rasanen, J. Konemann, R. J. Haug, M. J. Puska, R. M. Nieminen, Phys. Rev. B **70**, 115308 (2004).
 [11] Г. Г. Зегря, Письма журн. тех. физ. **32**(4), 75 (2006).
 [12] S. Sadeghi, Physica E, **41**, 1319 (2009).
 [13] I. F. I. Mikhail, I. M. M. Ismail, Superlatt. Microstruct. **48**, 388 (2010).
 [14] Jian-Hui Yuan, Chao Liu in Physica E **41**, 41 (2008).
 [15] V. I. Boichuk, I. V. Bilynskyi, R. Ya. Leshko, L. M. Turyanska, Physica E **44**, 476 (2011).
 [16] І. Вакарчук, *Квантова механіка* (Львівський національний університет, Львів, 2004).

ENERGIES AND WAVE FUNCTIONS OF THE ELECTRON IN THE CdS/SiO₂ SPHERICAL QUANTUM DOT WITH ONE AND TWO HYDROGENIC IMPURITIES

V. Holovatsky, I. Frankiv
 Chernivtsi National University, Chernivtsi, Ukraine
 E-mail: v.holovatsky@chnu.edu.ua

The electron spectrum and wave functions in the spherical quantum dot with a hydrogenic impurity are investigated in the effective mass approximation by the variational method as well as that of the perturbation theory. The investigations are performed for the cases of the on-center, off-center and external impurities. The estimations of accuracy of the electron energy and wave functions which were obtained by the variation method are performed. Discussed in the paper is the convergence of the results obtained by the variational method with exact solutions of the Shrodinger equation for the on-center impurity with the results of the perturbation theory for external impurity. The electron ground state energy in quantum dot with two donor impurities is calculated by the variation method and by the method of perturbation theory. It is shown that in the limited case when both impurities are in the center of the quantum dot the electron ground state energy coincides with the known result for a doubleionized impurity.