ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
Т. 11, № 4 (2010) С. 935-943

PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLID STATE
V. 11, № 4 (2010) P. 935-943

PACS: 73.21.La, 79.60.Jv

ISSN 1729-4428

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

Спектри дірок та акцепторів у закритій двошаровій сферичній квантовій точці

Кафедра теоретичної фізики, Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, вул. Стрийська 3, м. Дрогобич, Львівська обл. 82100, E-mail: leshkoroman@mail.ru

Для двошарової сферичної наногетероструктури $CdSe/ZnSe/матриця$, нехтуючи гофрованістю ізоенергетичних поверхонь в k-просторі, на основі гамільтоніана 4x4 обчислено енергію дискретних станів дірки та водневоподібної акцепторної домішки як функції розмірів квантової точки. Одержано точні розв'язки всіх радіальних рівнянь для дірки без домішки та для одного типу станів з акцепторною домішкою. Матричне радіальне рівняння для дірки акцепторної домішки розв'язано наближеними методами квантової механіки. Визначено діапазони розмірів квантової точки, в межах яких гетеромежі чинять вагомий вплив на енергію дірки.

Ключові слова: 4-зонний гамільтоніан, акцепторна домішка, двошарова квантова точка

Стаття поступила до редакції 17.11.2009; прийнята до друку 15.09.2010.

Вступ

Значна частина теоретичних та експериментальних досліджень присвячена домішковим станам у різних обмежених системах, зокрема у квантових точках (КТ). Протягом останніх 20 років у багатьох роботах добре теоретично описано фізичні властивості одношарових сферичних КТ. Зокрема, досліджуючи домішкові стани у них [1 - 5], отримано точні розв'язки рівняння Шредінгера з кулонівською потенціальною взаємодією між частинками. Показано різницю між одержаними результатами за наявності домішки та при її відсутності. Зараз сучасні експериментальні методи дозволяють створювати багатошарові квантові точки (КТ) як закритого, так і відкритого типу [6 - 8]. Для сферично-симетричних багатошарових КТ гетероструктур з врахуванням простого параболічного закону дисперсії квазічастинок, моделі прямокутних сферично-симетричних потенціальних ям і бар'єрів методом S-матриці одержано розв'язки відповідних рівнянь Шредінгера [9 - 10]. Визначено залежності енергетичних спектрів частинок від геометричних розмірів шарів наногетероструктури.

Нижчі дискретні стани водневоподібної донорної домішки у центрі сферично-симетричної двошарової КТ обчислено у [11]. Досліджено генезис енергетичних рівнів при зміні розмірів шарів КТ, розглянуто граничний випадок переходу багатошарової КТ в одношарову.

У більшості кристалів, що утворюють гетеросистеми, структура валентної зони є складною і виродженою у точці $\vec{k} = 0$, тоді як зону провідності цих кристалів можна описувати простим квадратичним законом дисперсії. Тому, щоб дослідити власні стани дірки у КТ, необхідно врахувати складний зонний спектр [12 - 14]. У роботах [15 - 17] в рамках чотири-, шести-, та восьмизонних гамільтоніанів одержано розв'язки рівняння Шредінгера для дірки у простій сферичні КТ. Співвідношення між енергетичними зонними параметрами для кремнієвих КТ таке, що при обчисленні діркових станів можна використовувати тризонний гамільтоніан. Саме такий підхід реалізовано у роботі [18]. Застосовуючи восьмизонну модель до багатошарової сферичної КТ, у роботі [19] визначено електронні та діркові s- і p - стани. Визначено радіальні компоненти хвильової.

Незважаючи на те, що значна кількість робіт присвячена дослідженню акцепторних станів як у масивних кристалах, так і наногетероструктур з КТ, актуальним залишається завдання побудови послідовної теорії акцепторних домішок у багатошарових КТ. Отже, мета цієї роботи полягає у дослідженні діркових та домішкових станів закритої сферичної двошарової КТ, визначенні впливу геометричних розмірів шарів КТ на одночастинкові стани. Конкретні обчислення проведено для гетеросистеми $CdSe/ZnSe/матриця$.

I. Постановка задачі та її розв'язання

1.1. Дірковий гамільтоніан 4x4 і хвильові функції. Розглядається двошарова КТ (рис. 1), що поміщена у матрицю. У центрі такої системи знаходиться негативно заряджений іон акцепторної домішки. Радіус внутрішнього шару – a, зовнішнього – b, тому $a \le b$. Внутрішній шар має діелектричну проникність e_1, а зовнішній шар КТ –

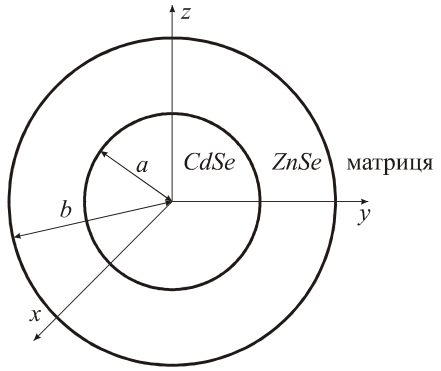

Рис. 1. Схематична модель наногетеросистеми.

e_2. Діелектрична проникність матриці e_3. Вважаємо, що гетеросистема утворена кристалами з великою забороненою зоною E_g і сильною спін-орбітальною взаємодією Δ. Тому можна знехтувати зоною провідності та вважати та спін-відщепленою зоною. Для спрощення запису формул для дірки вісь відліку енергії у валентній зоні направлено «вниз» і вибрано систему одиниць, де $m_0 = 1,\ \hbar = 1,\ e = 1.$ Враховуючи зазначене вище та нехтуючи гофрованістю ізоенергетичних поверхонь (сферичне наближення), kp – гамільтоніан системи можна записати у вигляді [20]:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2}\left(g_1 + \frac{5}{2} g \right)\mathbf{p}^2 - g\left(\mathbf{p}\,\mathbf{J}\right)^2 + \Pi\left(\mathbf{r}\right). \quad (1)$$

де $g = \frac{1}{5}(3g_3 + 2g_2)$, g_1, g_2, g_3 – параметри Латтінджера. Оператор спінового моменту $\mathbf{J}$ відповідає спіну 3/2. Потенціальна енергія дірки є сумою двох енергій:

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

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

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

Енергію взаємодії іона акцептора з діркою $V_c(r)$ представлено наступною формулою:

$$V_c(r) = \frac{1}{e r}, \quad (4)$$

де $e = \left(e^{(1)} + e^{(2)}\right)/2$. У запропонованій моделі не враховується наявність поляризаційних зарядів на гетеромежах.

Хвильову функцію, що є власною функцією гамільтоніана (1), можна записати як добуток радіальної частини на власну функцію, що відповідає квадрату повного моменту імпульсу

$$\mathbf{F}^2 = \left(\mathbf{J} + \mathbf{L}\right)^2: \quad (5)$$

$$\Phi^l_{f,M}(q,j) = \sum_{m=-l}^{l} \sum_{m_j=-3/2}^{3/2} C^{f,M}_{l,m;3/2,m_j} Y_{l,m}(q,j)\, c_{m_j} \quad (6)$$

де $f(f+1)$, $l(l+1)$, M, m, m_j у вибраній системі одиниць є власними значеннями операторів $\mathbf{F}^2$, $\mathbf{L}^2$, $\mathbf{F}_z$, $\mathbf{L}_z$, $\mathbf{J}_z$ відповідно, $C^{f,M}_{l,m;3/2,m_j}$ – коефіцієнти Клебша-Жордана, c_{m_j} – спінові функції, $Y_{l,m}$ – сферичні гармоніки, які є власними функціями оператора $\mathbf{L}^2$. Враховуючи загальні правила додавання моментів імпульсу, розв'язки рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (1) можна записати для трьох типів станів [14, 16]:

$$\begin{cases} y^{\ I}_{f,M} = R^{f-3/2}_f(r)\Phi^{f-3/2}_{f,M}(q,j) + R^{f+1/2}_f(r)\Phi^{f+1/2}_{f,M}(q,j), & f \ge 3/2,\ l = f - 3/2,\ f + 1/2, \\ y^{\ II}_{f,M} = R^{f-1/2}_f(r)\Phi^{f-1/2}_{f,M}(q,j) + R^{f+3/2}_f(r)\Phi^{f+3/2}_{f,M}(q,j), & f \ge 3/2,\ l = f - 1/2,\ f + 3/2, \\ y^{\ III}_{f,M} = R^{l}_{1/2}(r)\Phi^{l}_{1/2,M}(q,j), & f = 1/2,\ l = 1,\ 2. \end{cases} \quad (7)$$

Якщо підставляти функції (7) у рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (1), домножити зліва на відповідні спряжені спінори $\Phi^{\,l}_{f,M}(q,j)$, то можна для заданих станів одержати радіальні рівняння:

$$\frac{1}{2} g_1 \begin{pmatrix} -(1 + C_1)\Delta_l & C_2 \mathbf{A}^{-}_{l+1}\mathbf{A}^{-}_{l+2} \\ C_2 \mathbf{A}^{+}_{l+1}\mathbf{A}^{+}_{l} & -(1 + C_3)\Delta_{l+2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R^i_2(r) \\ R^i_1(r) \end{pmatrix} + \Pi(r) \begin{pmatrix} R^i_2(r) \\ R^i_1(r) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} R^i_2(r) \\ R^i_1(r) \end{pmatrix}, \quad (8)$$

де $R^i_1 = R^{f+1/2}_f \vee R^{f+3/2}_f, \quad R^i_2 = R^{f-3/2}_f \vee R^{f-1/2}_f,$

i=I, II.

Для третього типу станів радіальне рівняння має вигляд:

$$-\frac{1}{2}g_1(1+m)\left(\Delta_l R^l_{1/2}(r)\right)+\Pi(r)R^l_{1/2}(r)=ER^l_{1/2}(r). \qquad (9)$$

У формулах (8)-(9) введено позначення:

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

$$C_1=C_1(f,L)=m\sqrt{5}(-1)^{3/2+L+f}\begin{Bmatrix} L & L & 2\\ 3/2 & 3/2 & f\end{Bmatrix}\sqrt{\frac{2L(2L+1)(2L+2)}{(2L+3)(2L-1)}}$$

$$C_2=C_2(f,L)=m\sqrt{30}(-1)^{3/2+L+f}\begin{Bmatrix} L+2 & L & 2\\ 3/2 & 3/2 & f\end{Bmatrix}\sqrt{\frac{(L+1)(L+2)}{2L+3}}$$

$$C_3=-C_1,\quad (C_1)^2+(C_2)^2=m^2,\qquad C_2/m>0,\qquad m=\frac{2g}{g_1}.$$

Тут для запису коефіцієнтів використано 6-j символи. Маючи радіальні рівняння, можна знайти енергію та хвильові функції дірки.

1.2. Власні стани дірки без домішки. Нехай акцепторна домішка відсутня у КТ. Тоді у формулі (2) необхідно врахувати, що $V_C(r)=0$. У цьому випадку три рівняння (8) - (9) матимуть точні розв'язки. У внутрішній області КТ ($r\le a$) розв'язки відповідних рівнянь запишуться за допомогою функцій Бесселя першого роду:

$$R^{i,(1)}_1(r)=\frac{B^{(1)}_1}{\sqrt{r}}\mathrm{J}_{L+\frac{5}{2}}\left(\frac{k^{(1)}r}{\sqrt{1-(m^{(1)})^2}}\right)+\frac{B^{(1)}_2}{\sqrt{r}}\mathrm{J}_{L+\frac{5}{2}}\left(\frac{k^{(1)}r}{\sqrt{1+(m^{(1)})^2}}\right), \qquad (13)$$

$$R^{i,(1)}_2(r)=\frac{B^{(1)}_1(C^{(1)}_1-m^{(1)})}{\sqrt{r}\sqrt{(m^{(1)})^2-(C^{(1)}_1)^2}}\mathrm{J}_{L+\frac{1}{2}}\left(\frac{k^{(1)}r}{\sqrt{1-(m^{(1)})^2}}\right)+\frac{B^{(1)}_2(C^{(1)}_1+m^{(1)})}{\sqrt{r}\sqrt{(m^{(1)})^2-(C^{(1)}_1)^2}}\mathrm{J}_{L+\frac{1}{2}}\left(\frac{k^{(1)}r}{\sqrt{1+(m^{(1)})^2}}\right), \qquad (14)$$

$$R^{l,(1)}_{1/2}(r)=\frac{N^{(1)}_1}{\sqrt{r}}\mathrm{J}_{l+1/2}\left(l^{(1)}r\right), \qquad (15)$$

де $k^{(1)}=\sqrt{2E/g^{(1)}_1}$, $l^{(1)}=\sqrt{2E/\left(g^{(1)}_1(1+m^{(1)})\right)}$. Тут всі позначення з верхнім індексом (1) стосуються внутрішнього шару КТ.

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

$$R^{i,(2)}_1(r)=\frac{D^{(2)}_1}{\sqrt{r}}\mathrm{K}_{L+\frac{5}{2}}\left(\frac{k^{(2)}r}{\sqrt{1-(m^{(2)})^2}}\right)+\frac{D^{(2)}_2}{\sqrt{r}}\mathrm{K}_{L+\frac{5}{2}}\left(\frac{k^{(2)}r}{\sqrt{1+(m^{(2)})^2}}\right) \qquad (16)$$

$$+\frac{D^{(2)}_3}{\sqrt{r}}\mathrm{I}_{L+\frac{5}{2}}\left(\frac{k^{(2)}r}{\sqrt{1-(m^{(2)})^2}}\right)+\frac{D^{(2)}_4}{\sqrt{r}}\mathrm{I}_{L+\frac{5}{2}}\left(\frac{k^{(2)}r}{\sqrt{1+(m^{(2)})^2}}\right),$$

$$R_2^{i,(2)}(r)=\frac{D_1^{(2)}\left(-C_1^{(2)}+m^{(2)}\right)}{\sqrt{r}\sqrt{\left(m^{(2)}\right)^2-\left(C_1^{(2)}\right)^2}}\mathrm{K}_{L+\frac{1}{2}}\left(\frac{k^{(2)}r}{\sqrt{1-\left(m^{(2)}\right)^2}}\right)+\frac{D_2^{(2)}\left(-C_1^{(2)}-m^{(2)}\right)}{\sqrt{r}\sqrt{\left(m^{(2)}\right)^2-\left(C_1^{(2)}\right)^2}}\mathrm{K}_{L+\frac{1}{2}}\left(\frac{k^{(2)}r}{\sqrt{1+\left(m^{(2)}\right)^2}}\right)+$$
$$\frac{D_3^{(2)}\left(-C_1^{(2)}+m^{(2)}\right)}{\sqrt{r}\sqrt{\left(m^{(2)}\right)^2-\left(C_1^{(2)}\right)^2}}\mathrm{I}_{L+\frac{1}{2}}\left(\frac{k^{(2)}r}{\sqrt{1-\left(m^{(2)}\right)^2}}\right)+\frac{D_4^{(2)}\left(-C_1^{(2)}-m^{(2)}\right)}{\sqrt{r}\sqrt{\left(m^{(2)}\right)^2-\left(C_1^{(2)}\right)^2}}\mathrm{I}_{L+\frac{1}{2}}\left(\frac{k^{(2)}r}{\sqrt{1+\left(m^{(2)}\right)^2}}\right), \quad (17)$$

$$R_{1/2}^{l,(2)}(r)=\frac{N_2^{(2)}}{\sqrt{r}}\mathrm{K}_{l+1/2}\left(l^{(2)}r\right)+\frac{N_3^{(2)}}{\sqrt{r}}\mathrm{I}_{l+1/2}\left(l^{(2)}r\right), \quad (18)$$

де

$$k^{(2)}=\sqrt{2(U_0-E)/g_1^{(2)}},\ \ l^{(2)}=\sqrt{2(U_0-E)/\left(g_1^{(2)}\left(1+m^{(2)}\right)\right)}$$

Верхній індекс (2) стосується другого шару КТ. У випадку $E>U_0$ розв'язки зручно зобразити за допомогою функцій Бесселя першого роду і функцій Неймана:

$$R_1^{i,(2)}(r)=\frac{D_1^{(2)}}{\sqrt{r}}\mathrm{J}_{L+\frac{5}{2}}\left(\frac{k^{(2)}r}{\sqrt{1-\left(m^{(2)}\right)^2}}\right)+\frac{D_2^{(2)}}{\sqrt{r}}\mathrm{J}_{L+\frac{5}{2}}\left(\frac{k^{(2)}r}{\sqrt{1+\left(m^{(2)}\right)^2}}\right)$$
$$+\frac{D_3^{(2)}}{\sqrt{r}}\mathrm{N}_{L+\frac{5}{2}}\left(\frac{k^{(2)}r}{\sqrt{1-\left(m^{(2)}\right)^2}}\right)+\frac{D_4^{(2)}}{\sqrt{r}}\mathrm{N}_{L+\frac{5}{2}}\left(\frac{k^{(2)}r}{\sqrt{1+\left(m^{(2)}\right)^2}}\right), \quad (19)$$

$$R_2^{i,(2)}(r)=\frac{D_1^{(2)}\left(C_1^{(2)}-m^{(2)}\right)}{\sqrt{r}\sqrt{\left(m^{(2)}\right)^2-\left(C_1^{(2)}\right)^2}}\mathrm{J}_{L+\frac{1}{2}}\left(\frac{k^{(2)}r}{\sqrt{1-\left(m^{(2)}\right)^2}}\right)+\frac{D_2^{(2)}\left(C_1^{(2)}+m^{(2)}\right)}{\sqrt{r}\sqrt{\left(m^{(2)}\right)^2-\left(C_1^{(2)}\right)^2}}\mathrm{J}_{L+\frac{1}{2}}\left(\frac{k^{(2)}r}{\sqrt{1+\left(m^{(2)}\right)^2}}\right)+$$
$$\frac{D_3^{(2)}\left(C_1^{(2)}-m^{(2)}\right)}{\sqrt{r}\sqrt{\left(m^{(2)}\right)^2-\left(C_1^{(2)}\right)^2}}\mathrm{N}_{L+\frac{1}{2}}\left(\frac{k^{(2)}r}{\sqrt{1-\left(m^{(2)}\right)^2}}\right)+\frac{D_4^{(2)}\left(C_1^{(2)}+m^{(2)}\right)}{\sqrt{r}\sqrt{\left(m^{(2)}\right)^2-\left(C_1^{(2)}\right)^2}}\mathrm{N}_{L+\frac{1}{2}}\left(\frac{k^{(2)}r}{\sqrt{1+\left(m^{(2)}\right)^2}}\right), \quad (20)$$

$$R_{1/2}^{l,(2)}(r)=\frac{N_2^{(2)}}{\sqrt{r}}\mathrm{J}_{l+1/2}\left(l^{(2)}r\right)+\frac{N_3^{(2)}}{\sqrt{r}}\mathrm{N}_{l+1/2}\left(l^{(2)}r\right), \quad (21)$$

де:

$$k^{(2)}=\sqrt{2\left(E-U_0\right)/g_1^{(2)}},\quad l^{(2)}=\sqrt{2\left(E-U_0\right)/\left(g_1^{(2)}\left(1+m^{(2)}\right)\right)}$$

Зважаючи на те, що потенціальна енергія дірки (3) у матриці вважається нескінченно великою, то відповідні радіальні складові хвильової функції дорівнюють нулю у всій цій області. Маючи точні розв'язки, з граничних умов та умови нормування можна одержати спектр дірки.

1.3. Енергетичний спектр дірки акцепторної домішки. Нехай у центрі КТ є акцепторна домішка. Розглянемо спочатку рівняння (9) для III-типу станів. Якщо $r\le a$, то рівняння (9) можна записати компактно

$$-\frac{1}{2t^{(1)}}\left(\Delta_l R_{1/2}^l\right)-\frac{1}{er}R_{1/2}^l-ER_{1/2}^l=0. \quad (22)$$

Для $t^{(1)}=1/g_1^{(1)}\left(1+m_1^{(1)}\right)$. Рівняння (22) необхідно розв'язувати у двох діапазонах енергії: $E<0$, $E>0$.

Якщо $E<0$, то зручно ввести наступні позначення $x^{(1)}=a^{(1)}r$, $\left(a^{(1)}\right)^2=-8t^{(1)}E$, $l^{(1)}=2t^{(1)}/\left(ea^{(1)}\right)$, $R_{1/2}^l\left(x^{(1)}\right)=g^{(1)}\left(x^{(1)}\right)/x^{(1)}$, з якими рівняння (22) зведеться до рівняння Віттекера

$$\frac{\partial^2}{\left(\partial x^{(1)}\right)^2}g^{(1)}+\left[-\frac{1}{4}+\frac{l^{(1)}}{x^{(1)}}-\frac{l(l+1)}{\left(x^{(1)}\right)^2}\right]g^{(1)}=0. \quad (23)$$

Розв'язком (23) у розглядуваній області є

функція Віттекера $\mathrm{M}_{l_1,l+1/2}\left(x^{(1)}\right)$[21], яку можна подати за допомогою гіпергеометричної функції

$$g^{(1)}\left(x^{(1)}\right)=D^{(1)}e^{-x^{(1)}/2}\left(x^{(1)}\right)^{l+1}\mathrm{M}\left(l+1-l^{(1)},2l+2,x^{(1)}\right) \quad (24)$$

де $\mathrm{M}(a,b,x)$ – гіпергеометрична функція 1-го роду [21]. Коли ж $E>0$, то, провівши наступну заміну змінних

$x^{(1)}=b^{(1)}r,\ \left(b^{(1)}\right)^2=2t^{(1)}E,\ d^{(1)}=-t^{(1)}/\left(eb^{(1)}\right),$

$R^l_{1/2}\left(x^{(1)}\right)=g^{(1)}\left(x^{(1)}\right)/x^{(1)}$, рівняння (22) зведеться до рівняння Кулона:

$$\frac{\partial^2}{\left(\partial x^{(1)}\right)^2}g^{(1)}+\left[1-\frac{2d^{(1)}}{x^{(1)}}-\frac{l(l+1)}{\left(x^{(1)}\right)^2}\right]g^{(1)}=0, \quad (25)$$

розв'язок якого у розглядуваній області можна представити у вигляді за допомогою регулярної функції Кулона $\mathrm{F}_l\left(d^{(1)},x^{(1)}\right)$. Її можна виразити через гіпергеометричну функцію 1-го роду [21]:

$$g^{(1)}\left(x^{(1)}\right)=D^{(1)}\frac{2^l e^{-pd^{(1)}/2}\left|\Gamma\left(l+1+id^{(1)}\right)\right|}{\Gamma(2l+2)}e^{-ix^{(1)}}\left(x^{(1)}\right)^{l+1}\mathrm{M}\left(l+1-id^{(1)},2l+2,2ix^{(1)}\right), \quad (26)$$

де Γ(z) – гамма-функція Ейлера [21]. Якщо $a<r\le b$, то рівняння (9) також можна записати компактно:

$$-\frac{1}{2t^{(2)}}\left(\Delta_l R^l_{1/2}\right)-\frac{1}{er}R^l_{1/2}-\tilde{E}R^l_{1/2}=0, \quad (27)$$

де $t^{(2)}=1/\left(g_1^{(2)}\left(1-m^{(2)}\right)\right)$, $\tilde{E}=E-U_0$. На відміну від одношарових КТ, рівняння (27) у даній області потрібно розглядати для двох діапазонів зміни енергії: $\tilde{E}<0$, $\tilde{E}>0$.

Якщо $\tilde{E}<0$, то заміною змінних $x^{(2)}=a^{(2)}r$, $\left(a^{(2)}\right)^2=-8t^{(2)}\tilde{E}$,

$l^{(2)}=2t^{(2)}/\left(ea^{(2)}\right)$, $R^l_{1/2}\left(x^{(2)}\right)=g^{(2)}\left(x^{(2)}\right)/x^{(2)}$

рівняння (27) можна звести до рівняння Віттекера, розв'язки якого можна представити за допомогою функцій Віттекера [21]:

$$g^{(2)}\left(x^{(2)}\right)=D^{(2)}\,\mathrm{M}_{l^{(2)},l+1/2}\left(x^{(2)}\right)+B^{(2)}\mathrm{W}_{l^{(2)},l+1/2}\left(x^{(2)}\right) \quad (28)$$

У випадку $\tilde{E}>0$ рівняння (27) можна звести до рівняння Кулона, зробивши наступну заміну змінних

$$x^{(2)}=b^{(2)}r,\ \left(b^{(2)}\right)^2=2t^{(2)}\tilde{E},$$
$$d^{(2)}=-t^{(2)}/\left(eb^{(2)}\right),$$
$$R^l_{1/2}\left(x^{(2)}\right)=g^{(2)}\left(x^{(2)}\right)/x^{(2)}.$$

Розв'язок одержаного рівняння представлено за допомогою регулярної та логарифмічної функції Кулона [21]:

$$g^{(2)}\left(x^{(2)}\right)=D^{(2)}\,\mathrm{F}_l\left(d^{(2)},x^{(2)}\right)+B^{(2)}\,\mathrm{G}_l\left(d^{(2)},x^{(2)}\right). \quad (29)$$

Рівняння (10) для акцепторної домішки точних розв'язків не має. Тому його розв'язок шукатимемо у вигляді розкладу точної хвильової функції акцептора на функціях задачі без домішки:

$$\begin{pmatrix}R^i_{2,a}(r)\\R^i_{1,a}(r)\end{pmatrix}=\sum_n a_n\begin{pmatrix}R^i_{2,n}(r)\\R^i_{1,n}(r)\end{pmatrix}. \quad (30)$$

Підставляючи (30) у (10) і домножуючи на спряжений вектор-рядок, можна одержати однорідну систему рівнянь для коефіцієнтів c_i:

$$\sum_n\left(\left(E^i{}_n-E_a\right)d_{mn}+W_{mn}\right)a_n=0, \quad (31)$$

де E_n, $\begin{pmatrix}R^i_{2,n}(r)\\R^i_{1,n}(r)\end{pmatrix}$ – n-й енергетичний рівень та n-а радіальна функція дірки без домішки, що визначається розв'язками (13) - (21),

$$W_{mn}=\int drr^2V_C(r)\left[\left(R^i_{2,m}\right)^*R^i_{2,n}+\left(R^i_{1,m}\right)^*R^i_{1,n}\right].$$

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

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

$$\left(R_2^{i,(1)}(r) \right)\Big|_{r=a} = \left(R_2^{i,(2)}(r) \right)\Big|_{r=a}, \quad R_{1/2}^{l,(1)}(r)\Big|_{r=a} = R_{1/2}^{l,(2)}(r)\Big|_{r=a}, \tag{32}$$

З неперервності нормальної складової оператора вектора швидкості $\mathbf{V}_r = \vec{r}/r\left(\partial \mathbf{H}/\partial \vec{\mathbf{p}}\right)$, що пропорційний потоку густини ймовірності через сферичну поверхню КТ, одержано ще три рівняння для радіальних компонентів хвильової функції

$$\begin{pmatrix} \mathbf{T}_{11}^{i,(1)} & \mathbf{T}_{12}^{i,(1)} \\ \mathbf{T}_{21}^{i,(1)} & \mathbf{T}_{22}^{i,(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_2^{i,(1)}(r) \\ R_1^{i,(1)}(r) \end{pmatrix}\Big|_{r=a} = \begin{pmatrix} \mathbf{T}_{11}^{i,(2)} & \mathbf{T}_{12}^{i,(2)} \\ \mathbf{T}_{21}^{i,(2)} & \mathbf{T}_{22}^{i,(2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_2^{i,(2)}(r) \\ R_1^{i,(2)}(r) \end{pmatrix}\Big|_{r=a}, \tag{33}$$

$$g_1^{(1)}\left(1+m^{(1)}\right)\frac{d}{dr}R_{1/2}^{l,(1)}(r)\Big|_{r=a} = g_1^{(2)}\left(1+m^{(2)}\right)\frac{d}{dr}R_{1/2}^{l,(2)}(r)\Big|_{r=a}. \tag{34}$$

У формулах (33)-(34) використано такі позначення:

$$\mathbf{T}_{11}^{i,\{1,\atop 2\}} = \frac{b_1^{i,\{1,\atop 2\}}}{r} + b_2^{i,\{1,\atop 2\}}\frac{\partial}{\partial r} - 3g_4^{f,L}\frac{c_1^{i,\{1,\atop 2\}}}{r}$$

$$\mathbf{T}_{12}^{i,\{1,\atop 2\}} = -b_3^{i,\{1,\atop 2\}}\mathbf{Q}_{f+1/2}^{(-1)},$$

$$\mathbf{T}_{21}^{i,\{1,\atop 2\}} = b_3^{i,\{1,\atop 2\}}\mathbf{Q}_{f-3/2}^{(1)},$$

$$\mathbf{T}_{22}^{i,\{1,\atop 2\}} = -\frac{b_1^{i,\{1,\atop 2\}}}{r} + b_4^{i,\{1,\atop 2\}}\frac{\partial}{\partial r} + g_{-8}^{f,L}\frac{c_2^{i,\{1,\atop 2\}}}{r}.$$

Тут введено позначення:

$$b_1^{I,\{1,\atop 2\}} = \frac{3(2f-3)}{4f}g^{\{1,\atop 2\}},$$

$$b_2^{I,\{1,\atop 2\}} = \frac{2f-3}{2f}g^{\{1,\atop 2\}} + g_1^{\{1,\atop 2\}},$$

$$b_3^{I,\{1,\atop 2\}} = \frac{g^{\{1,\atop 2\}}}{2}\frac{\sqrt{3}}{f}\sqrt{4f(f+1)-3},$$

$$b_4^{I,\{1,\atop 2\}} = \frac{3-2f}{2f}g^{\{1,\atop 2\}} + g_1^{\{1,\atop 2\}},$$

$$b_1^{II,\{1,\atop 2\}} = \frac{3(2f+5)}{4(f+1)}g^{\{1,\atop 2\}},\ b_2^{II,\{1,\atop 2\}} = -\frac{2f+5}{2(f+1)}g^{\{1,\atop 2\}} + g_1^{\{1,\atop 2\}},$$

$$b_3^{II,\{1,\atop 2\}} = \frac{g^{\{1,\atop 2\}}\sqrt{3}}{2}\sqrt{\frac{-3+4f(f+1)}{(f+1)^2}},$$

$$b_4^{II,\{1,\atop 2\}} = \frac{2f+5}{2(f+1)}g^{\{1,\atop 2\}} + g_1^{\{1,\atop 2\}},$$

$$c_1^{I,\{1,\atop 2\}} = \left(f-\frac{3}{2}\right)\left(1-5g^{\{1,\atop 2\}} + g_1^{\{1,\atop 2\}}\right),$$

$$c_2^{I,\{1,\atop 2\}} = \frac{(2f+9)}{6}\left(5g^{\{1,\atop 2\}} - g_1^{\{1,\atop 2\}} - 1\right),$$

$$c_1^{II,\{1,\atop 2\}} = \left(f+\frac{5}{2}\right)\left(-1+5g^{\{1,\atop 2\}} - g_1^{\{1,\atop 2\}}\right),$$

$$c_2^{II,\{1,\atop 2\}} = \frac{(2f-7)}{6}\left(1-5g^{\{1,\atop 2\}} + g_1^{\{1,\atop 2\}}\right),$$

$g_n^{f,p} = p\left(f+1/2-pn/2\right)$, де $p=\pm 1$ для парних і непарних станів відповідно. Як і всюди індекс *i* позначає два типи станів: I та II, а верхній індекс (1) чи (2) стосується внутрішнього чи зовнішнього шарів КТ відповідно. За допомогою рівнянь (33) - (34) можна визначити енергетичний спектр дірки і акцепторної домішки.

II. Результати експерименту та їх обговорення

Числові розрахунки дискретного енергетичного спектру проведено для КТ наногетеросистеми $CdSe/ZnSe/матриця$, параметри якої наступні [8, 14, 22]: $a_0 = 5.832\,\text{Å}$, $g_1^{(1)} = 1.66$, $g^{(1)} = 0.41$, $e^{(1)} = 9.63$, $E_g^{(1)} = 1.67\,\text{eV}$, $\Delta^{(1)} = 0.42\,\text{eV}$,

$a_0 = 5.667\,\text{Å}$, $g_1^{(2)} = 9.1$, $g^{(2)} = 1.412$, $e^{(2)} = 8.1$, $E_g^{(2)} = 2.7\,\text{eV}$, $\Delta^{(2)} = 0.43\,\text{eV}$, $U_0 = 0.52\,\text{eV}$. Аналізуючи параметри кристалів, видно, що діелектричні проникності кристалів близькі. Саме тому в роботі не враховуються поляризаційні заряди, а для обчислень вибрано середнє значення діелектричної проникності. Також видно, що внаслідок досить великих енергетичних зазорів між вершиною валентної зони та зоною провідності і спін-відщепленою зоною, можна

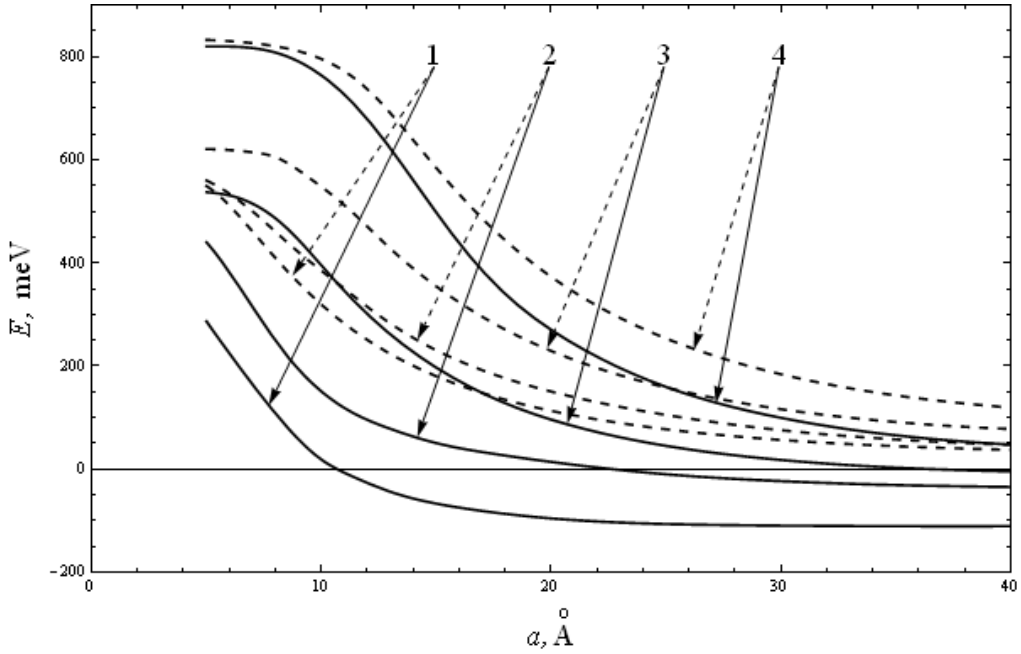

Рис. 2. Залежність енергії основного та нижчих збуджених станів дірки без домішки (штрихові криві) і з домішкою (суцільні криві) від внутрішнього радіуса КТ. $b = 40\,\text{Å}$.
1 – 1S3/2-стан, 2 – 1P3/2-стан, 3 – 1P5/2-стан, 4 – 1P1/2-стан.

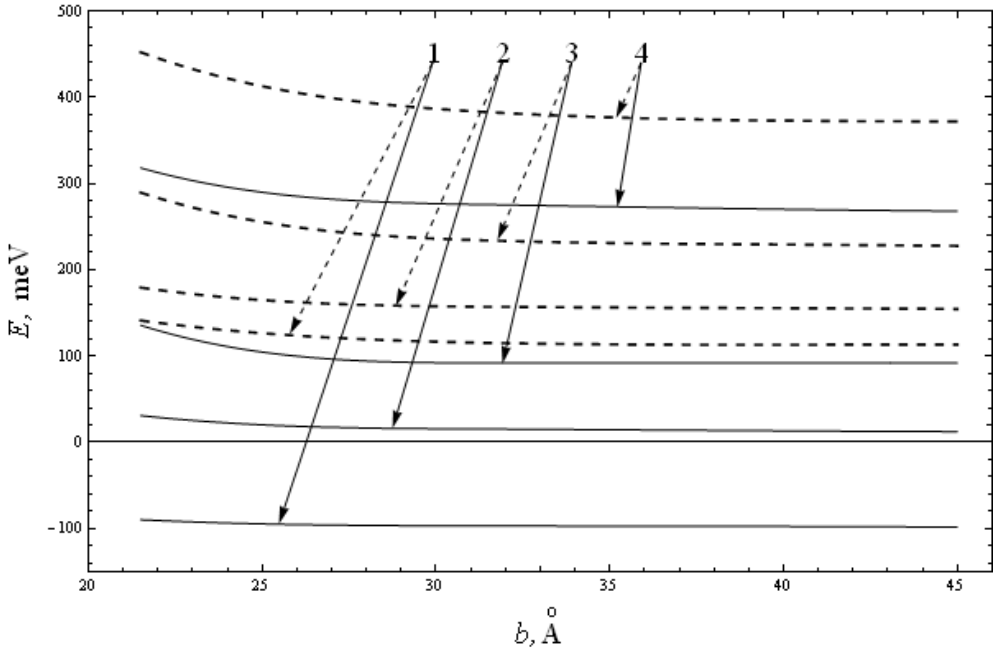

Рис. 3. Залежність енергії основного та нижчих збуджених станів дірки без домішки (штрихові лінії) та з домішкою (суцільні лінії) від зовнішнього радіуса КТ. $b = 20\,\text{Å}$.
1 – 1S3/2-стан, 2 – 1P3/2-стан, 3 – 1P5/2-стан, 4 – 1P1/2-стан.

адекватно використовувати сферичну модель Латтінджера 4х4.

На рис.2 подано результати обчислення основного і нижчих збуджених станів дірки для різних внутрішніх радіусів КТ при фіксованому $b = 40\,\text{Å}$ як за наявністю домішки, так і за її відсутності. З рисунка видно, що коли шар $ZnSe$ є малим ($a \to b$), то енергетичні рівні дірки прямують до відповідних рівнів одношарової $CdSe$ КТ з нескінченним потенціалом на межі. Зменшення внутрішнього радіуса КТ збільшує просторове обмеження, тому енергія системи зростає. Тут основну роль відіграє перша гетеромежа. Подальше зменшення внутрішнього радіуса КТ ($a < 9 \div 13\,\text{Å}$) спричинює проникання електрона у шар $ZnSe$ і вплив першої гетеромежі зменшується, а енергетичні рівні стають такими ж, як у одношаровій $ZnSe$ КТ, які збільшені на величини U_0. Наявність акцепторної домішки приведе до зменшення енергії дірки. Якщо радіус КТ $a = 30\,\text{Å}$, енергія для основного стану за наявністю та відсутністю домішки відрізняється на величину $E_{h-a} = E_{1S_{3/2}} - E_{1S_{3/2};A} = 166.3\,\text{meV}$. Ця величина зумовлена зміною профілю потенціальної ями. Для великих радіусів КТ енергія дірки у полі розмірного квантування буде малою. Тому за наявності іона акцепторної домішки енергія дірки визначатиметься лише потенціальною енергією (4). Зменшення радіуса КТ веде до зростання E_{h-a}. Це зумовлено тим, що домішка уповільнює зростання енергії дірки зі зменшенням геометричних розмірів гетеросистеми. Подальше зменшення радіуса ($a < 8\,\text{Å}$) веде до зменшення E_{h-a}. Причиною такої поведінки є зменшення ролі потенціальної енергії (4) для дірки акцепторної домішки. Якісно поведінка цієї різниці узгоджується з відповідною різницею для водневоподібної донорної домішки [1].

Для того, щоб провести повний аналіз діркового та акцепторного спектру в двошаровій КТ, на рис.3 подано графіки залежності енергії дірки від зовнішнього радіуса КТ (шару $ZnSe$) при фіксованому внутрішньому радіусі $a = 20\,\text{Å}$.

Якісно поведінка енергетичних рівнів як з домішкою, так і без неї подібна. Акцепторна домішка веде до зменшення відповідного енергетичного рівня дірки. З графіка видно, що для великих зовнішніх радіусів КТ ($b \to \infty$) енергія дірки відповідає енергії дірки в одношаровій КТ $CdSe/ZnSe$, а $E_{1S_{3/2}} - E_{1S_{3/2};A} = 211.5\,\text{meV}$. Зменшення зовнішнього радіуса веде до зростання впливу другої гетеромежі, яка збільшує просторове обмеження. Це веде до відносно незначного зростання енергії дірки як з домішкою так і без неї. Таке невелике зростання зумовлено тим, що основний вплив чинить перша гетеромежа, розміри якої фіксовані. Внаслідок вище зазначених причин, величина $\left(E_{1S_{3/2}} - E_{1S_{3/2};A}\right)$ при зменшенні зовнішнього радіуса зазнає невеликого зростання.

Висновки

Отже, у запропонованій роботі на основі гамільтоніану 4х4 одержано радіальні рівняння для дірки у сферичній двошаровій КТ, знайдено точні розв'язки відповідних рівнянь. А для акцепторної домішки знайдено точні розв'язки рівняння для III типу станів, що описується 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. Цінність результатів полягає в тому, що одержані аналітичні розв'язки можна використати також для визначення спектру n-шарових сферично-симетричних КТ. У роботі показано, що енергетичні спектри дірки та акцептора сильно залежать від геометричних розмірів першої гетеромежі. Друга гетеромежа чинить менший вплив на енергію. Однак, якщо розмір першого шару КТ досить малий, то вплив другої гетеромежі може посилюватися. Визначено, що акцепторна домішка веде до зменшення енергії гетеросистеми як для малих, так і для великих радіусів.

Бойчук В.І. **–** доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри теоретичної фізики;
Білинський І.В. **–** кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри теоретичної фізики;
Лешко Р.Я. **–** аспірант.

[1] Jia-Lin Zhu. Confined electron and hydrogenic donor states in a spherical quantum dot of GaAs-$Ga_{1-x}Al_xAs$ // *Phys. Rev. B*, **41**(9), pp. 6001-6007 (1990).

[2] Chun-Ching Yang, Li-Chi Liu, and Shih-Hsin 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. Березовський Спектр і хвильові функції водневоподібної домішки, розміщеної в центрі квантової точки // *Фіз. і хім. тверд. тіла*, **4**(2), сс. 213-220 (2003).

[4] V.I. Boichuk, I.V. Bilynskyi, R.Ya. Leshko. Ground and exited states of D^0 and D^- donors in a spherical quantum dot // *Ukr. J. Phys.*, **53**(10), pp. 991-996 (2008).

[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] D. Schooss, A. Mews, A. Eychmuller, H. Weller. Quantum-dot quantum well CdS/HgS/CdS: Theory and experiment // *Phys. Rev. B*, **49**(24), pp. 17072-17078 (1994).
[7] A. Mews, A.V. Kadavanich, U. Banin, A.P. Alivasatos. Structural and spectroscopic investigations of CdS/HgS/CdS quantum-dot quantum wells // *Phys. Rev. B*, **53**(20), pp. R13242-R13245 (1996).
[8] B.O. Dabbousi, J. Rodriguez-Viejo, F.V. Mikulec, J.R. Heine, H. Mattoussi, R. Ober, K.F Jensen, and M.G. Bawendi. (CdSe)ZnS Core-Shell Quantum Dots: Synthesis and Characterization of a Size Series of Highly Luminescent Nanocrystallites // *J. Phys. Chem.*, **101**(46), pp. 9463-9475 (1997).
[9] Н.В. Ткач, Ю.А. Сети. Свойства электронного спектра в двухъямной закрытой сферической квантовой точке и его эволюция при изменении толщины внешней ямы // *ФТП*, **40**(9), сс. 1111-1119 (2006).
[10] М.В. Ткач, О.М. Войцехівська, В.А. Головацький, О.М. Маханець, А.М. Грищук. Спектри квазічастинок у багатошарових напівпровідникових наногетеросистемах // *ЖФД*, **10**(4), сс. 315-329 (2006).
[11] Cheng-Ying Hsieh. Lower Lying States of Hydrogenic Impurity in A Multi-Layer Quantum Dot // *Chinese Journal of Physics*, **38(**3-I), pp. 478-490 (2000).
[12] J.M. Luttinger and W. Kohn. Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields. // *Phys. Rev.*, **97**(4), pp. 869-888 (1955).
[13] J.M. Luttinger. Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors: General theory // *Phys. Rev.*, **102**(4), pp. 1030-1041 (1956).
[14] A. Baldereshi, Nunzio O. Lipari. Spherical model of shallow acceptor states in semiconductors // *Phys. Rev. B*, **8**(6), pp. 2697-2709 (1973).
[15] E. Menéndez-Proupin and C. Trallero-Giner. Electric-field and exciton structure in CdSe nanocrystals // *Phys. Rev. B*, **69**(12), pp. 125336-125345 (2004).
[16] Г.Б. Григорян, Э.М. Казарян, А.Л. Эфрос, Т.В. Язева. Квантование дырки и край поглощения в сферичных микрокристаллах полупроводников со сложной структурой валентной зоны // *ФТТ*, **32**(6), с. 1772-1779 (1990).
[17] E.P. Pokatilov, V.A. Fonoberov, V.M. Fomin and J.T. Devreese. Development of an eight-band theory for quantum dot heterostructures // *Phys. Rev. B*, **64**(24), pp. 245328–245344 (2001).
[18] A.S. Moskalenko, J. Berakdar, and other. Single-particle states in spherical Si/SiO_2 quantum dots // *Phys. Rev. B*, **76**(8), pp. 085427-085427 (2007).
[19] E.P. Pokatilov, V.A. Fonoberov, V.M. Fomin and J.T. Devreese. Electron and hole states in quantum dot quantum wells within a spherical eight-band model // *Phys. Rev. B*, **64(**24), pp. 245-329(7) (2001).
[20] Б.И. Шкловский, А.Л. Эрос. Электронные свойства легированных полупроводников. Наука, М. 416 с. (1979).
[21] M. Abramowitz and 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).
[22] В.И. Гавриленко, А.М. Грехов, Д.И. Корбутяк, В.Г. Литовченко. Оптические свойства полупроводников. Справочник. Наукова думка. Киев (1987).

V.I. Boichuk, I.V. Bilynskyi, R.Ya. Leshko

Hole and Acceptor Spectra in a Closed Two-Layer Spherical Quantum Dot

Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University, Department of Theoretical Physics, 3 Stryiska St., Drohobych, Lviv Region, 82100 E-mail: leshkoroman@mail.ru

The hole Hamiltonian for was used for calculation of discrete states of the hole and acceptor impurity in a two-layer spherical $CdSe/ZnSe/матрица$ nanoheterostructure as a function of the quantum dot radii by neglecting the corrugation of constant-energy surfaces. The hole exact solution of all radial equation without impurity were obtain, and one acceptor equation was solved exactly too. The matrix radial equation was solved approximately using quantum mechanics methods. The range of quantum dot sizes was defined, in which the heteroboundary make the main effect on the hole energy.

Key words: 4-band Hamiltonian, acceptor impurity, two-layer quantum dot.