ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
Т. 14, № 1 (2013) С. 34-39

PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLID STATE
V. 14, № 1 (2013) P. 34-39

PACS: 71.55.-I, 73.22.-F, 73.21.LA, 78.20.CI

ISSN 1729-4428

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

Оптичні властивості сферичної квантової точки з двома нейтральними домішками

Дрогобицький державний педагогічний університет ім. І. Франка,
вул. Стрийська, 3, м. Дрогобич, 82100, e-mail: leshkoroman@mail.ru

У цій роботі досліджено дві нейтральні домішки у квантовій точці. Визначено синглетні та триплетні стани. Проаналізовано вплив взаємного розташування домішок на енергетичний спектр системи та на коефіцієнт поглинання світла, що зумовлений міжрівневими переходами.

Ключові слова: домішка, коефіцієнт поглинання світла, синглетний і триплетний стани/

Стаття поступила до редакції 06.09.2012 ; прийнята до друку 15.12.2012.

Вступ

Сьогодні існує багато напівпровідникових приладів на основі наноструктур та [1]. Параметри цих приладів вагомо залежать від якості матеріалів, зокрема від наявності дефектів та домішок. На даний час відома значна кількість теоретичних робіт, в яких проведено дослідження як донорних [2 - 5], так і акцепторних [6 - 7] домішок у квантових точках (КТ). Аналізуються домішки у центрі КТ та поза ним, враховують поляризаційні заряди, а також вплив складної структури валентної зони на спектри акцепторів.

У більшості робіт, що присвячені дослідженню домішкових станів у сферичних КТ, аналізується одна водневоподібна домішка. Як показують експериментальні дані з одержання КТ, найчастіше домішка може потрапляти через поверхню у КТ. При великих концентраціях домішок під час легування можливе потрапляння у КТ більше однієї домішки. На сьогодні існує мала кількість теоретичних робіт, де були би досліджені енергетичні спектри двох і більше домішок у КТ. Зокрема у роботі [8] запропоновано варіаційний метод та теорію збурень для обчислення енергії основного стану одного електрона у полі двох іонів домішок. Доцільно також дослідити випадок двох нейтральних домішок, тобто розв'язати двоелектронну задачу. Крім того слід зазначити, що для обчислення оптичних міжрівневих переходів необхідно мати і збуджені стани у цій же системі.

Інтерес до міжрівневих переходів викликаний можливістю їх використання у детекторах терагерцового випромінювання [9], оскільки енергії зазначених переходів є у терагерцовому діапазоні. У зв'язку з цим появилася велика кількість робіт [9 - 15], де аналізуються міжрівневі переходи у КТ, вплив домішок та форми КТ на них.

Зважаючи на це все, метою поданої роботи є:

– визначення енергетичного спектру двох донорних домішок у КТ;

– обчислення оптичних параметрів КТ з двома домішками, що зумовлені міжрівневими переходами.

I. Теорія

Розглядається сферична КТ радіусом a, діелектричною проникністю e, в якій знаходяться дві нейтральні донорні водневоподібні домішки на відстані D від її центра. Систему координат вибрано так, що вісь z проходить через центр КТ та домішки. Гамільтоніан такої системи матиме вигляд:

$$\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_B + \Pi\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\right), \qquad (1)$$

де для домішки A $\mathbf{R}_A = \left(0,0,R_A\right) = \left(0,0,D\right)$, а для B $\mathbf{R}_B = \left(0,0,R_B\right) = \left(0,0,-D\right)$,

$$\hat{H}\begin{Bmatrix}A\\B\end{Bmatrix} = -\frac{\mathbf{h}^2}{2}\nabla\begin{Bmatrix}1\\2\end{Bmatrix}\frac{1}{m^*}\nabla\begin{Bmatrix}1\\2\end{Bmatrix} - \frac{e^2}{4pee_0\left|\mathbf{r}\begin{Bmatrix}1\\2\end{Bmatrix} - \mathbf{R}\begin{Bmatrix}A\\B\end{Bmatrix}\right|} + U\left(r\begin{Bmatrix}1\\2\end{Bmatrix}\right), \qquad (2)$$

$\Pi\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\right)$ є сумою:

$$\Pi\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\right) = \frac{1}{4pee_0}\left(\frac{e^2}{\left|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\right|} + \frac{e^2}{\left|\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B\right|} - \frac{e^2}{\left|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_B\right|} - \frac{e^2}{\left|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_A\right|}\right), \qquad (3)$$

Тут потенціальна енергія, що зумовлена розривом зон гетероструктури, вибрано у вигляді сферично-симетричної прямокутної потенціальної ями:

$$U\left(r\right) = \begin{cases}0, & r \le a,\\ U_0, & r > a.\end{cases} \qquad (4)$$

Оскільки розглядається гетеросистема, яка складається з кристалів з близькими значеннями діелектричних проникностей, то впливом поляризаційних зарядів можна знехтувати.

Поставлена двочастинкова задача точних розв'язків не має. Тому для її розв'язання використано метод Гайтлера-Лондона. Хвильову функцію двочастинкової системи для основного стану подано у вигляді симетризованого добутку одночастинкових хвильових функцій:

$$\Psi_1 = C\left\{y_{1S}\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_A\right)y_{1S}\left(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_B\right) \pm y_{1S}\left(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_A\right)y_{1S}\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_B\right)\right\} \qquad (5)$$

де знак «+» стосується синглетних, а «−» — триплетних станів,

$$C_1 = \frac{1}{\sqrt{2\left(1 \pm S_1^{\,2}\right)}}, \qquad (6)$$

$$S_1 = \int d\mathbf{r}_1\left\{y_{1S}\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_A\right)y_{1S}\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_B\right)\right\} \qquad (7)$$

— інтеграл перекриття. Одночастинкові хвильові функції задовольняють рівняння Шредінгера для одної нецентральної домішки:

$$\hat{H}\begin{Bmatrix}A\\B\end{Bmatrix}y_{1S}\left(\mathbf{r}\begin{Bmatrix}1\\2\end{Bmatrix}, \mathbf{R}\begin{Bmatrix}A\\B\end{Bmatrix}\right) = E_{1S}y_{1S}\left(\mathbf{r}\begin{Bmatrix}1\\2\end{Bmatrix}, \mathbf{R}\begin{Bmatrix}A\\B\end{Bmatrix}\right),. \qquad (8)$$

Це рівняння було розв'язано варіаційним методом Рітца у роботі [4]. Хвильові функції вибиралися у вигляді:

$$y_{1S}\left(\mathbf{r}, \mathbf{R}_A\right) = \begin{cases}B_{1,1}\cdot g_{1S,1}(r)\exp\left[-a_1\sqrt{r^2 + D^2 - 2r\,D\cos q}\right], & r \le a,\\ B_{1,2}\cdot g_{1S,2}(r)\exp\left[-b_1\sqrt{r^2 + D^2 - 2r\,D\cos q}\right], & r > a,\end{cases} \qquad (9)$$

$$B_{1,2} = B_{1,1}\exp\left[\left(b_1 - a_1\right)\sqrt{r^2 + D^2 - 2r\,D\cos q}\right]$$

$$b_1 = \frac{m_2^*}{m_1^*}a_1,$$

де $g_{1S,1}$ — сферична функція Бесселя нульового поряду першого роду у КТ, $g_{1S,2}$ — модифікована сферична функція Бесселя нульового поряду другого роду, $B_{1,1}$ — стала нормування, a_1 — варіаційний параметр, який також був отриманий у роботі [4].

Після підстановки функцій типу (9) у вираз для двочастинкової хвильової функції (5) було обчислено середнє значення гамільтоніану (1) на основі цієї функції. У результаті отримано енергію КТ з двома нейтральними домішками:

$$E = 2E_{1S} + \frac{K_1 \pm A_1}{1 \pm S_1^{\,2}}, \qquad (10)$$

де кулонівський та обмінний інтеграли мають вигляд:

$$K_1 = \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \left\{ y_{1S}\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_A\right) y_{1S}\left(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_B\right) \Pi\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\right) y_{1S}\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_A\right) y_{1S}\left(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_B\right) \right\}, \qquad (11)$$

$$A_1 = \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \left\{ y_{1S}\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_A\right) y_{1S}\left(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_B\right) \Pi\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\right) y_{1S}\left(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_A\right) y_{1S}\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_B\right) \right\}, \qquad (12)$$

Крім основного стану було визначено і перший збуджений стан. Нехай один електрон перебуває в 1S - стані, а другий у 2P - стані з (m = 0). Хвильова функція матиме вигляд аналогічний (5):

$$\Psi_2 = C_2 \left\{ y_{1S}\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_A\right) y_{2P}\left(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_B\right) \pm y_{1S}\left(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_A\right) y_{2P}\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_B\right) \right\}, \qquad (13)$$

$$\tilde{N}_2 = \frac{1}{\sqrt{2\left(1 \pm S_{12} S_{22}\right)}}, \qquad (15)$$

де

$$S_{12} = \int d\mathbf{r}_1 y^*_{2P}\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_B\right) y_{1S}\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_A\right), \qquad (16)$$

$$S_{22} = \int d\mathbf{r}_1 y^*_{2P}\left(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_B\right) y_{1S}\left(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_A\right), \qquad (17)$$

Одночастинкова хвильова функція для збудженого 2P-подібного стану (m=0) також була визначена у роботі [4] і має вигляд:

$$y_{1P}\left(\mathbf{r}, \mathbf{R}_A\right) = \left(\cos q - D/c\right) \begin{cases} B_{2,1} \cdot g_{2P,1}(r) \exp\left[-a_2 \sqrt{r^2 + D^2 - 2rD\cos q}\right], & r \le a, \\ B_{2,2} \cdot g_{2P,2}(r) \exp\left[-b_2 \sqrt{r^2 + D^2 - 2rD\cos q}\right], & r > a. \end{cases}, \qquad (18)$$

Тут C – деяка стала, що визначається з умови ортогональності функцій (18) та (9). З граничних умов для функції (18) отримано:

$$B_{2,2} = B_{2,1} \exp\left[\left(b_2 - a_2\right)\sqrt{r^2 + D^2 - 2rD\cos q}\right], \qquad (19)$$

$$b_2 = \frac{m_1^* + m_2^*\left(a_2\left(\sqrt{a^2 + D^2 - 2aD\cos q} - 2\right) - 1\right)}{m_1^*\left(\sqrt{a^2 + D^2 - 2aD\cos q} - 2\right)}. \qquad (20)$$

$g_{2P,1}$ — сферична функція Бесселя першого поряду першого роду у КТ, $g_{2P,2}$ — модифікована сферична функція Бесселя першого порядку другого роду, $B_{2,1}$ — стала нормування, a_2 — варіаційний параметр, який визначено у [4].

Аналогічно, як для основного стану, визначено середнє значення гамільтоніана (1) та визначено енергію двох домішок у КТ для збудженого стану:

$$E_2 = E_{1S} + E_{2P} + \frac{K_2 \pm 2A_2}{2\left(1 \pm S_{12} S_{22}\right)}, \qquad (21)$$

де кулонівський та обмінний інтеграли мають вигляд:

$$K_2 = K_{21} + K_{22} = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \left(y_{1S}{}^*\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_A\right) y_{2P}{}^*\left(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_B\right) \Pi\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\right) y_{1S}\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_A\right) y_{2P}\left(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_B\right) \right) + \\ + \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \left(y_{1S}{}^*\left(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_A\right) y_{2P}{}^*\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_B\right) \Pi\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\right) y_{1S}\left(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_A\right) y_{2P}\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_B\right) \right), \qquad (22)$$

$$A_2 = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \left(y_{1S}{}^*\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_A\right) y_{2P}{}^*\left(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_B\right) \Pi\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\right) y_{1S}\left(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_A\right) y_{2P}\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_B\right) \right) \qquad (23)$$

Визначивши хвильові функції основного та першого збудженого станів, обчислено оптичні властивості КТ з домішками. Вважаємо, що КТ опромінюють монохроматичним світлом частотою W, яке лінійно поляризоване вздовж осі z. Для дворівневої системи дипольний момент переходу можна подати у вигляді:

$$d_{1,2} = \left\langle 2 \left| ez_1 + ez_2 \right| 1 \right\rangle = e \int d\mathbf{r} \Psi_2^* \left(r_1 \cos q_1 + r_2 \cos q_2\right) \Psi_1, \qquad (24)$$

а силу осцилятора записати так:

$$f_{1,2} = \frac{2m^*}{e^2 \mathbf{h}^2} (E_2 - E_1) \left| d_{1,2} \right|^2. \qquad (25)$$

Лінійний коефіцієнт поглинання світла, що зумовлений міжрівневим переходом з основного стану у перший збуджений стан визначено на основі формули з [10-12]:

$$a\left(w\right) = w\sqrt{\frac{m_0}{e_0 e}}\,\frac{s\left|d_{1,2}\right|^2 \mathbf{h}\Gamma_{1,2}}{\left(E_2 - E_1 - \mathbf{h}w\right)^2 + \left(\mathbf{h}\Gamma_{1,2}\right)^2}, \quad (26)$$

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

Отже, на основі поданих вище формул проведено обчислення енергії домішок та оптичні параметри. Шестикратні інтеграли обчислено методом Монте-Карло.

II. Аналіз одержаних результатів

На основі вище поданих формул обчислення проведено для КТ гетеросистеми CdS/SiO_2, параметри якої наступні: $m_1^* = 0,2m_0$, $m_2^* = 0,42m_0$, $e_1 = 5.5$, $e_2 = 3.9$, $U_0 = 2.7\,\text{eV}$. Радіус КТ $a = 40\,\text{A}$.

Результати обчислення енергії для синглетних та триплетних станів двох домішок у КТ подано на рис. 1. Енергію основного та збуджених станів позначено кривими 1 — синглетний стан (5), 2 — триплетний стан (5), 3 — синглетний стан (13), 4 — триплетний стан (13). В обох випадках енергія синглетних станів є меншою від триплетних, як і у вільній молекулі H_2. Однак на відміну від вільної молекули H_2 енергія триплетних станів також має мінімум, який зумовлений наявністю просторового

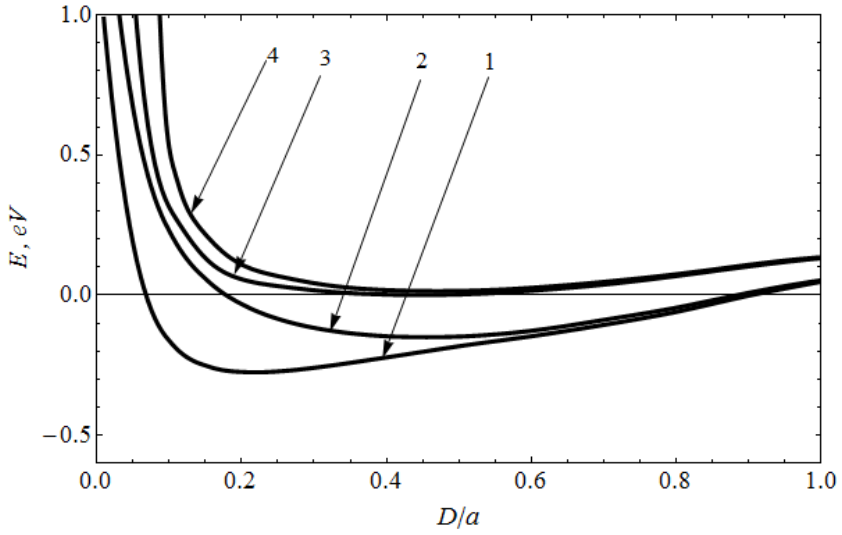

Рис. 1. Залежність енергії основного та збуджених станів від розташування домішок у КТ.

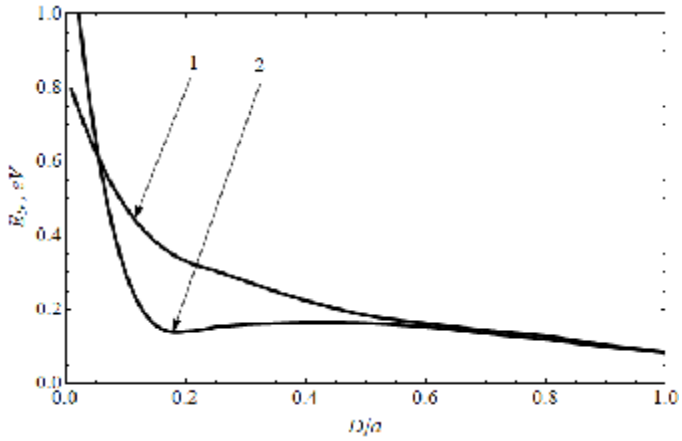

Рис. 2. Енергія переходу між синглетними (крива 1) та триплетними (крива 2) станами.

обмеження руху електронів у КТ. Віддалення домішок від центра КТ веде до наближення енергій синглетних та триплетних станів. Такий результат можна пояснити тим, що густина ймовірності перебування електронів має максимум в області $r \in (0, a)$ для усіх значень D/a [4], тобто електрони залишаються у КТ навіть при зміщенні іонів домішок за її межі. А при відсутності домішок у КТ двоелектронна система матиме лише один стан — синглетний. Якщо ж віддаляти ядра у молекулі H_2, то електрони залишатимуться зв'язаними зі своїми ядрами, тобто можна отримати два незалежні атоми.

На основі отриманих енергій та хвильових функцій обчислено дипольні моменти переходів системи з основного у перший збуджений стан. Згідно правил відбору за спіновими змінними переходи дозволені між станами синглетний-синглетний та триплетний-триплетний. Зважаючи на це, було визначено енергію переходу між зазначеними станами E_{tr} (рис. 2). З графіка видно немонотонну залежність енергії переходу між триплетними станами та монотонну — між синглетними. Оскільки енергії синглетних та триплетних станів для великих *D/a* наближаються одна до одної, то й енергія переходу має таку ж залежність. Усе це відобразиться на залежності коефіцієнта поглинання світла від розташування домішок (рис. 3, рис. 4). З рисунків видно, що віддалення домішок одна від одної веде до зміщення піків поглинання у низькоенергетичну область як для синглетних, так і для триплетних станів. Як видно зі значень, які набуває коефіцієнт поглинання, поглинання між синглетними станами є сильнішим, ніж між триплетними. Крім того, висота смуг поглинання між синглетними станами зменшується при віддаленні домішок, а між триплетними — зростає. Причиною такої залежності є аналогічна залежність дипольного моменту міжрівневих переходів електронів.

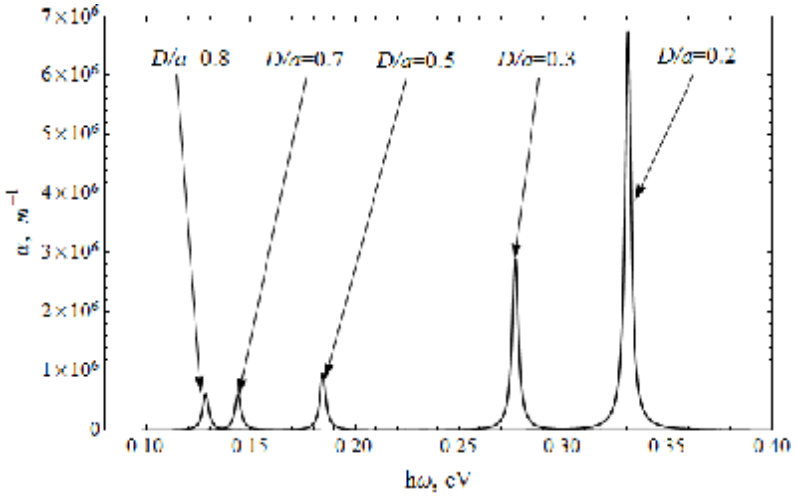

Рис. 3. Коефіцієнт поглинання світла для КТ з двома нейтральними домішками, що зумовлений міжрівневими переходами між синглетними станами для різних значень *D/a.*

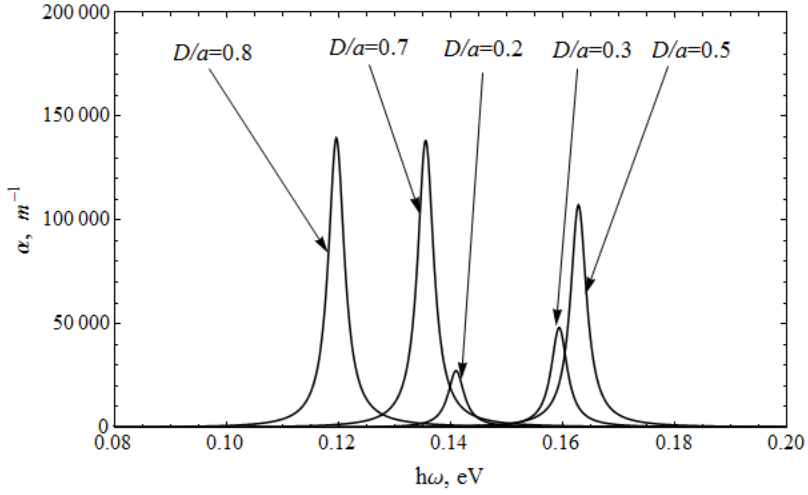

Рис. 4. Коефіцієнт поглинання світла для КТ з двома нейтральними домішками, що зумовлений міжрівневими переходами між триплетними станами для різних значень *D/a.*

Висновки

Отже, у цій роботі проведено теоретичне дослідження сферичної КТ з двома нейтральними донорними домішками, що дозволило встановити:

залежність енергетичного спектру домішкок від їх розташування у КТ і показати, що діаметральне віддалення домішок одна від одної веде до наближення енергії синглетних та триплетних станів;

лінійний оптичний коефіцієнт поглинання світла, який зумовлений міжрівнемими переходами електронів у КТ і показати, що зміщення домішок від центра КТ веде до зміщення смуг поглинання у низькоенергетичну область, як і для випадку однієї домішки.

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. - кандидат фізико-математичних наук, викладач кафедри теоретичної фізики;
Турянська Л.М. - аспірант Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка.

[1] D. Bimberg, M. Grundmann, N.N. Ledentsov. Quantum Dot Heterostructures. (Wiley, Chichester, 1999).
[2] M.V. Tkach, V.A. Golovac'kij, Ja.M. Berezovskij. Fiz. i him. tverd. tila. 4(2), 213 (2003).
[3] W. Xie. Superlattices and Microstructures 48(2), 239 (2010).
[4] V.I. Boichuk, I.V. Bilynskyi, R.Ya. Leshko, L.M. Turyanska. Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures 44(2), 476 (2011).
[5] S.S. Li, J.B. Xia. Phys. Lett. A 366(1–2), 120 (2007).
[6] A.F. Polupanov, V.I. Galiev, M.G. Novak. FTP 31(11), 1375 (1997).
[7] V.I. Boichuk, I.V. Bilynskyi, R.Ya. Leshko. Condensed Matter Physics 11(4), 653-661 (2008).
[8] V.A. Golovac'kij, I.B. Frankiv. Zhurnal fizichnih doslidzhen' 16(1/2), 1706(1) (2012).
[9] Wei Wu, Dibyendu Dey and Hooman Mohseni. J. Phys. D 43, 155101 (2010).
[10] M.R.K. Vahdani, G. Rezaei. Physics Letters A 373(34), 3079 (2009).
[11] G. Rezaei, M.R.K. Vahdani, and B. Vaseghi. Current Applied Physics 11(2), 176 (2011).
[12] G. Rezaei, M.R.K. Vahdani, M. Barati. Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics 3(2), 159 (2008).
[13] E. Sadeghi, A. Avazpour. Physica B: Condensed Matter 406(2), 241 (2011).
[14] Y. Yakar, B. Cakir, A. Ozmen. Optics Communications 283(9), 1795 (2010).
[15] V.I. Boichuk, I.V. Bilynskyi, O.A. Sokolnyk. Physics and Chemistry of a Solid State 13(3), 586 (2012).

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

Optical Properties of a Spherical Quantum Dot with Two Neutral Impurities

Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University, Institute of Physics, Mathematics and Computer Science, Department of Theoretical Physics, 3 Stryiska St., Drohobych, Lviv Region, 82100, e-mail: leshkoroman@mail.ru

Two neutral impurities in the QD have been studied in this work. The singlet and triplet states have been obtained. The influence of the relative position of impurities on the energy spectrum of the system and on the light absorption coefficient has been analyzed.

Keywords: impurity, light absorption coefficient, singlet and triplet states.