

УДК 538.958, 538.971

М.В. Ткач, В.А. Головацький, Я.М. Березовський

Спектр і хвильові функції водневоподібної домішки, розміщеної в центрі квантової точки

Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, Чернівці

Вперше побудована теорія спектра і хвильових функцій домішкового електрона у сферичних квантових точках (КТ) у середовищі з різною ефективною масою та величинами діелектричної проникливості у різних середовищах. Отримані точні розв'язки рівняння Шредінгера добре узгоджуються з експериментальними даними спектрів локалізованого домішкового екситона у малих квантових точках CdS, вміщених в силікатне скло, а також описують спектр електрона, який взаємодіє з донорною домішкою, розташованою в центрі квантової точки довільних розмірів. Показано, що при досить великому радіусі квантової точки енергетичний спектр електрона асимптотично наближається до воднеподібного.

Ключові слова: рівняння Шредінгера, екситон, CdS, квантова точка.

Стаття постуила до редакції 19.05.2003; прийнята до друку 23.05.2003

І. Вступ

Сучасна фізика напівпровідників – це фізика низькорозмірних систем. Напівпровідникові структури, обмежені в одному, двох чи в усіх трьох напрямках, виявляють нові цікаві фізичні властивості, які повністю відрізняються від властивостей об'ємних напівпровідників і ніколи не спостерігалися в них. Комбінацією двох чи більше напівпровідникових матеріалів із різною шириною забороненої зони вдається створювати різноманітні за симетрією та профілем потенціальні ями. Обмеження руху електронів та дірок у таких потенціальних ямах створює багато привабливих з точки зору практичного використання фізичних явищ.

Найбільш цікавими, як із точки зору теорії, так і практичного застосування є напівпровідникові структури, обмежені в усіх трьох напрямках – так звані квантові точки.

На даний час теоретичні дослідження наносистем виконуються, ґрунтуючись на двох основних підходах. Одним із них є опис наносистем, на основі мікроскопічних моделей [1]. В такому підході необхідно враховувати положення кожного атома наносистеми. Через складність такого опису найбільш поширеним на цей час є другий підхід, всі різновиди якого по суті зводяться до макроскопічного наближення, оскільки він ґрунтується на використанні таких макроскопічних параметрів, як ефективна маса та діелектрична проникність напівпровідникових матеріалів, з яких складається наносистема.

У рамках макроскопічного підходу отримані точні розв'язки одночастинкової задачі в

однозонному наближенні не тільки для простої сферичної квантової точки, але і для сферичних наноструктур із складним профілем потенціалу (багат шарові сферичні наноструктури [2-6]). На основі цих точних розв'язків потужним методом функцій Гріна побудовано теорію електрон-фононої взаємодії у сферичних наногетеросистемах [7]. Ця теорія дозволяє розрахувати перенормування енергетичного спектра вільного електрона внаслідок його взаємодії з обмеженими та інтерфейсними фононами.

Електрон-діркова взаємодія у квантових точках розглядалась багатьма авторами різними наближеними методами, наприклад, варіаційним методом [7], методом теорії збурень [8], ВКБ [9] та чисельним методом Монте-Карло. На основі отриманих у таких підходах результатів не можливо побудувати теорію екситон-фононої взаємодії у сферичній квантовій точці, яка є необхідною для пояснення температурних залежностей спектральних параметрів тих систем, які містять квантові точки.

Оскільки у більшості напівпровідників ефективна маса дірки значно більша за ефективну масу електрона, то у простих квантових точках малих розмірів дірка буде знаходитися ближче до центра КТ, і тому можна вважати, що вона поміщена у центрі наносистеми, і розглянути електрон у полі кулонівського потенціалу і прямокутного потенціалу КТ. Подібна задача розв'язувалася у роботі [15], але при цьому використовувалися два суттєвих спрощення моделі: вважалося що і діелектрична проникливість, і ефективна маса електрона є однаковими у ямі і у бар'єрі. У реальних наногетеросистемах це зовсім не так. Отже у цій роботі буде розв'язана задача про спектр і хвильові

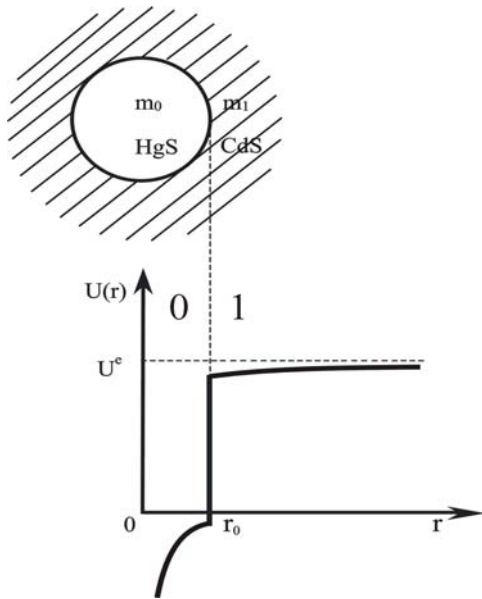


Рис.1. Геометрична схема сферичної наносистеми та потенціал електрона в наносистемі.

функції домішкового електрона в сферичній КТ у середовищі з різними діелектричними

проникливостями і ефективними масами у різних елементах наносистеми.

II. Постановка задачі. Розв’язок рівняння Шредінгера

Розглянемо сферичну квантову точку радіуса r_0 вміщену у зовнішнє масивне середовище, яке на межі середовищ створює для електрона потенціальний бар’єр V_0 (рис. 1). Електрон, положення якого визначається радіус-вектором \vec{r} взаємодіє з розміщеним у центрі квантової точки додатним зарядом e . Діелектричні проникливості середовищ і ефективна маса електрона у них вважаються в загальному випадку різними.

У рамках наближення ефективних мас, гамільтоніан системи складається з кінетичної енергії електрона, енергії його кулонівської взаємодії з додатним зарядом та потенціальної енергії розмірного квантування

$$H = -\nabla \frac{\hbar^2}{2m(r)} \nabla - \frac{e^2}{\epsilon(r)r} + V(r), \quad (1)$$

де

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r < r_0, \\ V_0, & r \geq r_0. \end{cases} \quad (2)$$

Ефективна маса електрона та діелектрична проникливість ϵ функціями відстані до центра

квантової точки

$$m(r) = \begin{cases} m_0, & r < r_0, \\ m_1, & r \geq r_0. \end{cases}, \quad \epsilon(r) = \begin{cases} \epsilon_0, & r < r_0, \\ \epsilon_1, & r \geq r_0. \end{cases}, \quad (3)$$

m_0, m_1 та ϵ_0, ϵ_1 – ефективні маси електрона у КТ і зовнішньому середовищі відповідно та діелектричні

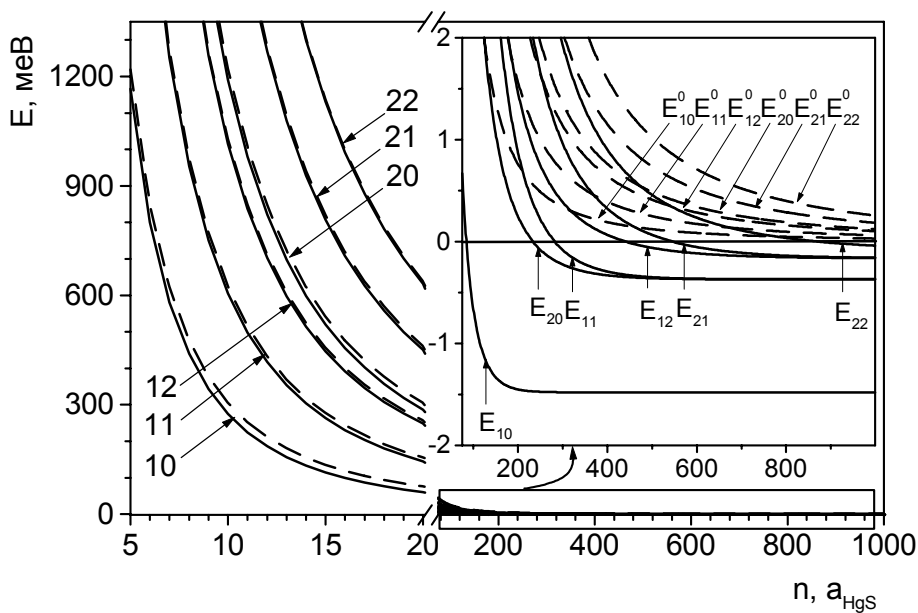


Рис. 2. Залежність енергетичного спектра електрона від радіуса квантової точки HgS/H₂O. Суцільні лінії – електрон взаємодіє з діркою, штрихові лінії – без урахування кулонівської взаємодії.

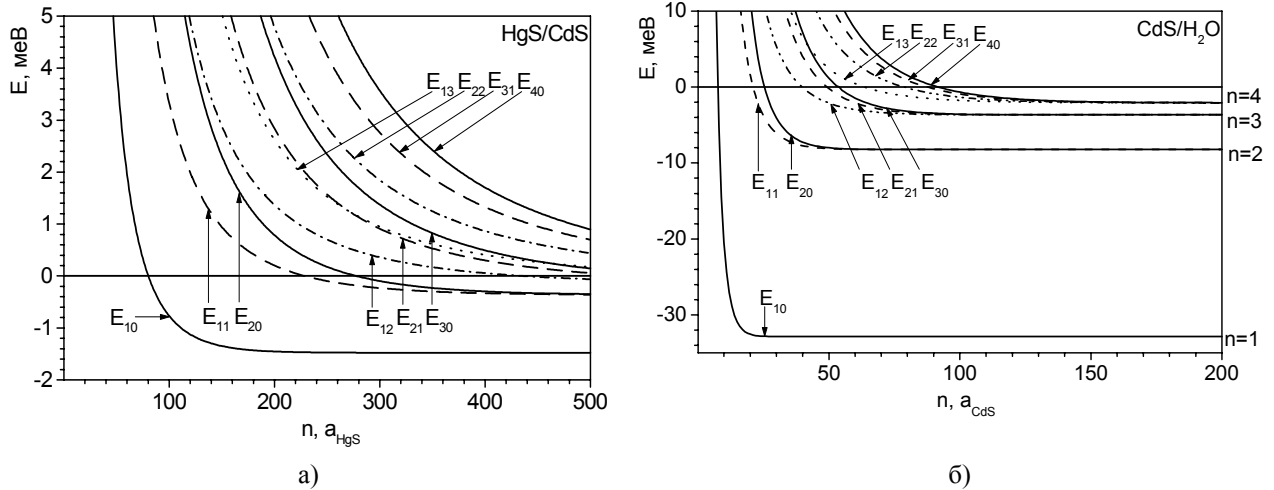


Рис. 3. Залежність енергетичного спектра електрона від радіуса квантової точки а) HgS/CdS б) CdS/H₂O. Суцільні лінії – стани з $l = 0$, штрихові лінії – $l = 1$, штрих-пунктирні $l = 2$ та $l = 3$.

проникливості різних середовищ.

Розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера у сферичних координатах шукатимемо у вигляді:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi). \quad (4)$$

Враховуючи залежності $V(r)$, $m(r)$ рівняння (5) доцільно розглядати окремо для двох областей сферичної наносистеми:

Після відділення кутової частини (зі сферичною функцією $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$), рівняння для радіальної хвильової функції матиме вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m(r)} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R(r) - \frac{e^2}{\varepsilon r} R(r) + V(r)R(r) = ER(r). \quad (5)$$

(I). Для $r < r_0$, $V(r) = 0$, $m(r) = m_0$. Рівняння (5) буде таке:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R(r) - \frac{e^2}{\varepsilon_0 r} R(r) = ER(r) \quad (6)$$

Якщо б електрон знаходився лише в потенціальному полі розмірного квантування, то при вибраному відліку енергії (рис. 1) його дискретні стани мали б лише додатні енергії. Але внаслідок існування ще й кулонівського притягуючого потенціалу, стає можливим існування зв'язаних станів із від'ємною енергією. Отже, розв'язки рівняння (6) можуть бути різними у двох областях енергій, які ми дослідимо окремо:

а) Для від'ємних енергій, $E < 0$. Введемо наступні позначення

$$\xi(r) = 2\sqrt{\frac{2m_0(-E)}{\hbar^2}}r, \quad \chi = \frac{e^2}{2\varepsilon_0\hbar}\sqrt{\frac{2m_0}{(-E)}}$$

$$R(r) = \frac{\rho(r)}{r}.$$

У результаті рівняння (6) у нових змінних матиме вигляд

$$\frac{\partial^2 \rho(r)}{\partial \xi^2} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{\chi}{\xi} + \frac{\frac{1}{4} - \left(1 + \frac{1}{2}\right)^2}{\xi^2} \right) \rho(r) = 0 \quad (7)$$

(7) – це рівняння Уіттекера [27, 28] розв'язком якого є функція

$$\rho_{\chi,1}(r) = e^{-\xi(r)/2} \xi(r)^{1+1} \Phi(1+1-\chi, 2l+2, \xi(r)), \quad (8)$$

де $\Phi(a, b, x)$ вироджена гіпергеометрична функція [18].

Отже розв'язок рівняння (6) матиме вигляд

$$R(r) = r^{-1} \rho_{\chi,1}(r) = e^{-\xi(r)/2} \xi(r)^{1+1} r^{-1} \Phi(1+1-\chi, 2l+2, \xi(r)). \quad (9)$$

б) В області додатніх енергій, увівши наступні позначення

$$k(r) = 2\sqrt{\frac{2m_0(-E)}{\hbar^2}}r, \quad \eta = -\frac{e^2}{\epsilon_0 \hbar} \sqrt{\frac{m_0}{2E}}$$

$R(r) = \frac{\rho(r)}{r}$ рівняння (6) отримаємо у вигляді:

$$\frac{\partial^2 \rho(r)}{\partial k^2} + \left(1 - \frac{2\eta}{k} - \frac{l(l+1)}{k^2}\right) \rho(r) = 0. \quad (10)$$

Рівняння (10) називається хвильовим рівнянням. Воно має два лінійно незалежні розв'язки $F_l(\eta, k)$ і

$G_l(\eta, k)$, які називають відповідно регулярною і нерегулярною функціями Кулона. З умови скінченності хвильової функції при $r = 0$ розв'язок рівняння (6) отримаємо у вигляді

$$R(r) = r^{-1} \rho(r) = r^{-1} C_1 F_l(\eta, k), \quad (11)$$

де C_1 - коефіцієнт нормування, а функція Кулона $F_l(\eta, k)$ виражається через гіпергеометричну функцію наступним чином:

$$F_l(\eta, k) = C_l(\eta) k(r)^{l+1} e^{-ik(r)} \Phi(l+1-i\eta, 2l+2, 2ik(r)), \quad (12)$$

де $C_l(\eta) = \frac{2^l e^{-\pi\eta/2} |\Gamma(l+1+i\eta)|}{\Gamma(2l+2)}$.

(II). Для $r \geq r_0$, $V(r) = U$, $m(r) = m_1$. Диференціальне рівняння для радіальної частини $R(r)$ матиме вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) - \frac{e^2}{\epsilon_1 r} R(r) + UR(r) = ER(r), \quad (13)$$

яке після уведення наступних позначень

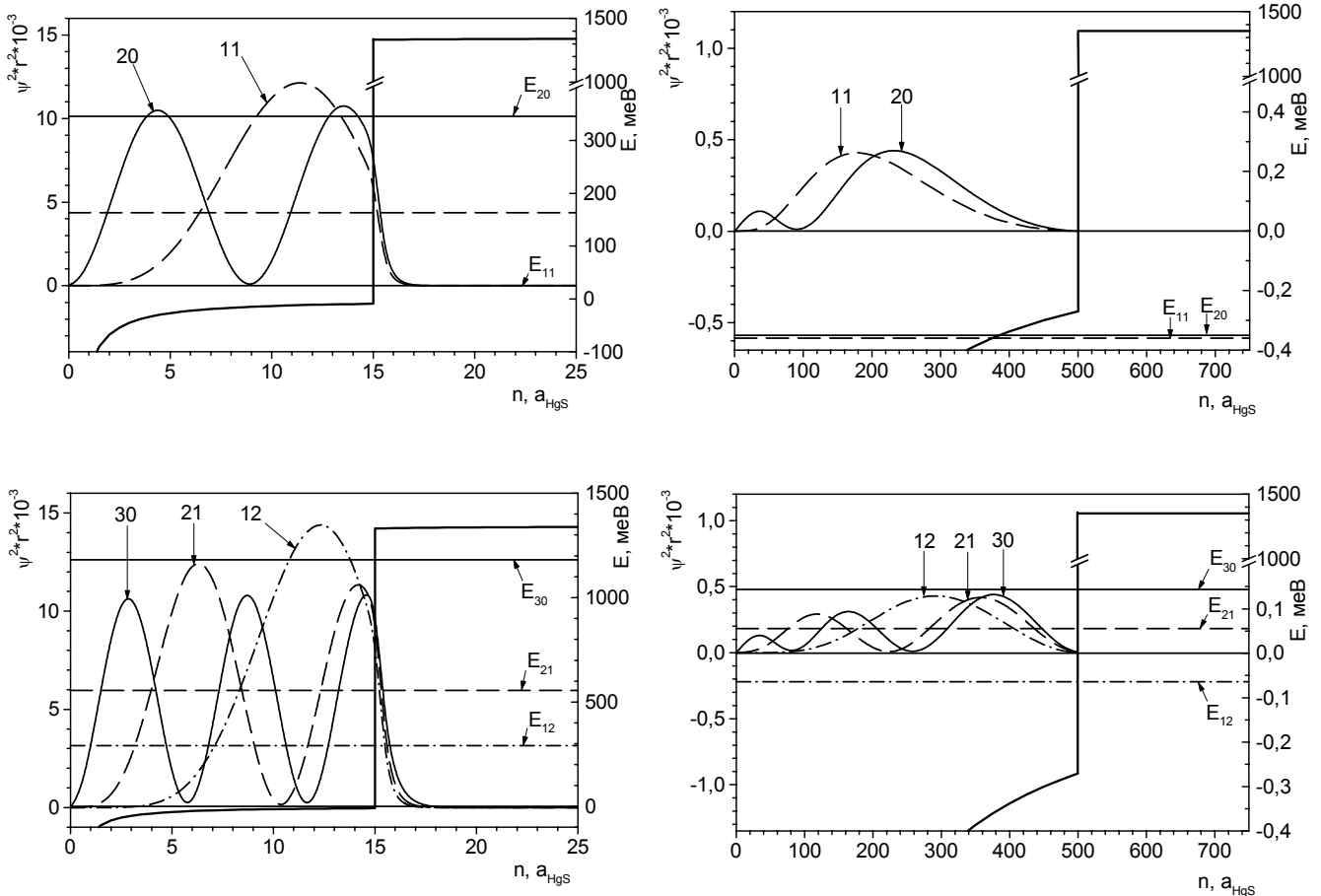


Рис. 4. Хвильові функції електрона у квантовій точці HgS/CdS. Суцільні лінії – стани з $l = 0$, штрихові лінії – $l = 1$, штрих-пунктирні $l = 2$ та $l = 3$.

Таблиця 1

Параметри матеріалів

	$m_e(m_0)$	$m_h(m_0)$	$a, (\text{Å})$	$E_g, (\text{eB})$	$V_e, (\text{eB})$	$V_h, (\text{eB})$	ϵ_0
CdS	0,2	0,7	5,818	2,5	3,65	6,3	9,1
HgS	0,036	0,044	5,851	0,5	5,0	5,5	18,2

$$\xi(r) = 2\sqrt{\frac{2m_1(U-E)}{\hbar^2}}r, \quad \chi = \frac{e^2}{2\epsilon_1\hbar}\sqrt{\frac{2m_1}{(U-E)}}$$

$$R(r) = \frac{\rho(r)}{r}$$

зведеться до рівняння Уіттекера (7).

Оскільки функція Уіттекера у вигляді (8) має складну поведінку при дуже великих ξ , то в цій області зручно використати інтегральне представлення функції Уіттекера

$$R(r) = r^{-1}\rho(r) = r^{-1}C_2 e^{-\xi(r)/2} \xi(r)^\chi \int_0^\infty e^{-t} t^{\chi+1} \left(1 + \frac{t}{\xi(r)}\right)^{\chi+1} dt \quad (14)$$

Із граничних умов, яким задовільняють хвильові функції і потік густини ймовірності електрона, отримуємо дисперсійне рівняння для знаходження енергетичного спектру електрона

$$\frac{R'_1(r_0)}{m_0\epsilon_0 R_1(r_0)} = \frac{R'_2(r_0)}{m_1\epsilon_1 R_2(r_0)}, \quad (15)$$

а також зв'язок між коефіцієнтами C_1 і C_2 .

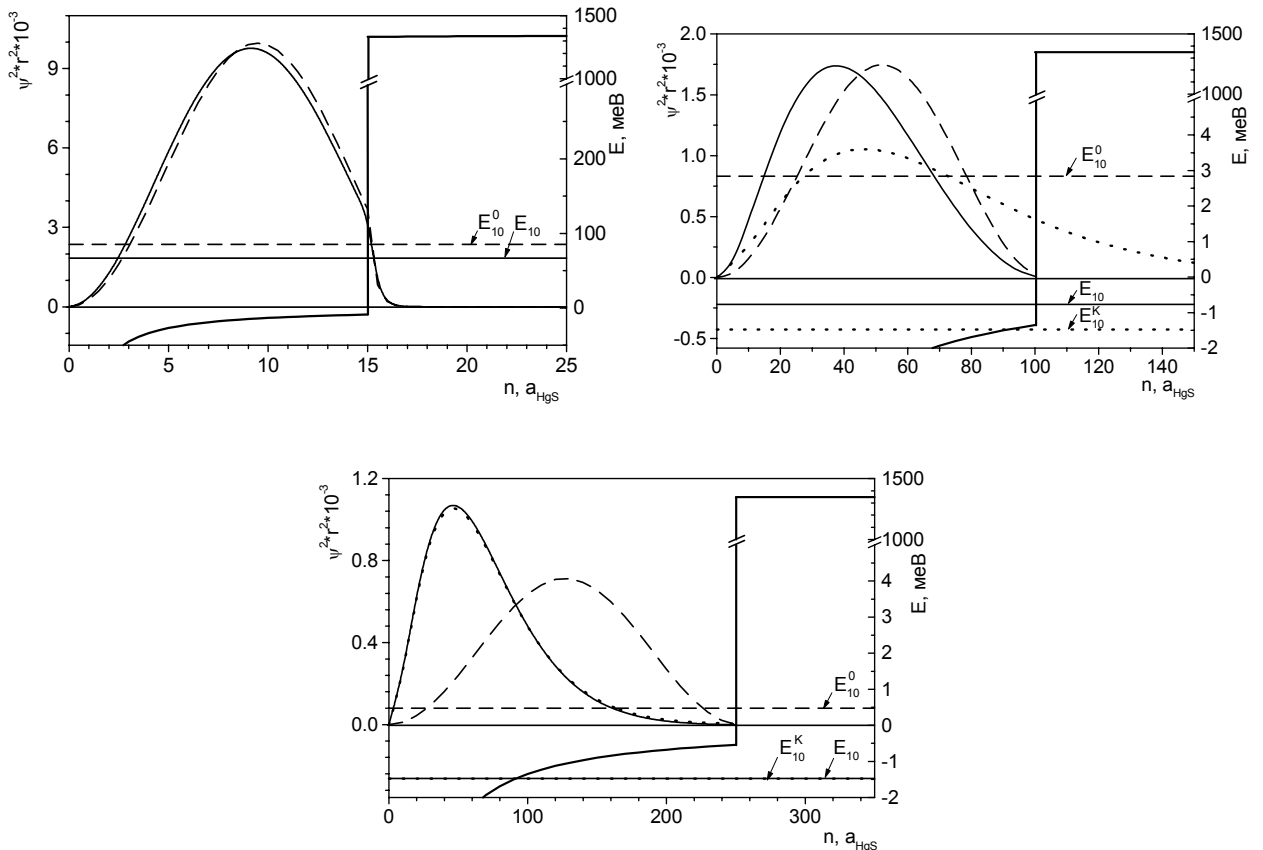


Рис. 5. Хвильові функції, енергія основного стану електрона та його потенціальна енергія у квантовій точці HgS/CdS. Суцільні лінії – з врахуванням кулонівської взаємодії; штрихові лінії – без врахування кулонівської взаємодії; пунктирні лінії – електрон у кулонівському полі дірки в масивному кристалі HgS.

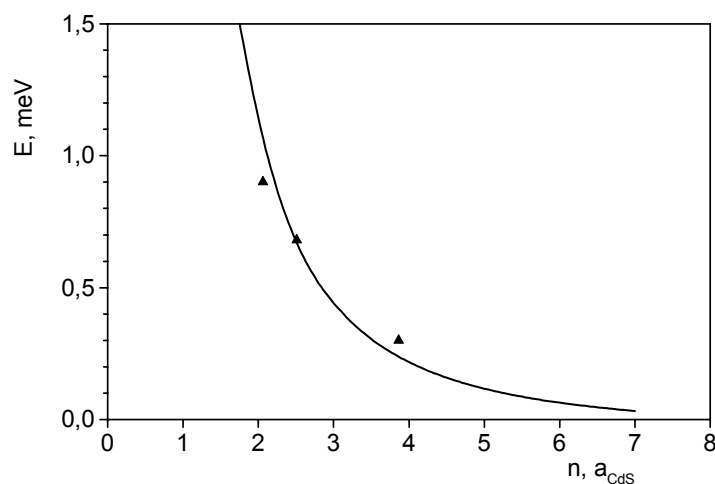


Рис. 6. Залежність енергії екситонного збудження (без енергії забороненої зони) від радіусу кристалу CdS, поміщеного в органічне скло. Суцільна лінія – теорія, трикутники – експериментальні дані [13, 14].

Використовуючи умову нормування

$$\int_0^{\infty} R^2(r) r^2 dr = 1, \quad (16)$$

отримуємо систему хвильових функцій домішкового електрона в квантовій точці з врахуванням кулонівської взаємодії з нерухомим додатним зарядом у центрі гетеросистеми.

III. Результати числових розрахунків

Числові розрахунки дискретного енергетичного спектра і хвильових функцій електрона виконувались для квантових точок HgS/CdS, HgS/H₂O, CdS/H₂O, CdS/скло. Фізичні параметри досліджуваних наносистем наведені в табл. 1.

На рис. 2 приведено залежності енергії основного та збуджених станів електрона від розмірів квантової точки HgS/H₂O, розрахованих з урахуванням кулонівської взаємодії з додатним зарядом у центрі квантової точки (суцільні лінії) та з врахуванням лише потенціалу розмірного квантування (штрихові лінії). З рис. 2 видно, що у квантових точках малих розмірів дискретний електронний спектр визначається потенціалом розмірного квантування, а кулонівська взаємодія приводить лише до незначного зміщення усіх енергетичних рівнів в область менших енергій, якісно не змінюючи його поведінки. Якщо радіус квантової точки більший ніж 70a_{HgS} (вставка на рис. 2), вплив кулонівського потенціалу стає порівняним із потенціалом розмірного квантування, що приводить до якісних змін у спектрі електрона.

Дискретні енергетичні рівні електрона, який знаходиться в сумарному полі розмірного квантування та кулонівського потенціалу, при

збільшенні розмірів квантової точки опускаються в область нижче дна потенціальної ями, тобто попадають у заборонену зону масивного кристалу HgS. У випадку відсутності кулонівської взаємодії всі енергетичні рівні електрона при збільшенні розмірів КТ прямують до дна потенціальної ями. На рис. 3 приведено залежності електронних енергетичних спектрів у квантових точках HgS/CdS (а) та CdS/H₂O (б), із яких добре видно цілком зрозумілу асимптотичну поведінку дискретних електронних рівнів при збільшенні радіуса квантової точки. Збільшення розмірів квантової точки приводить до зменшення розмірного квантування і енергетичний спектр стає воднеподібним, що відповідає енергетичному спектру електрона, який взаємодіє з додатним зарядом у масивному кристалі. Енергетичні рівні, які відповідають однаковим значенням суми головного та орбітального квантових чисел (N = n+1) при збільшенні радіуса КТ збігаються і отримується енергетичний спектр з виродженими за орбітальним квантовим числом станами.

На рис. 4 приведено вигляд електронних хвильових функцій у станах, які зі збільшенням r₀ вироджуються. З рисунка видно, що якщо для КТ малих розмірів хвильові функції електрона у таких станах суттєво відрізняються, то в КТ великих розмірів радіальні частини хвильових функцій електрона поступово зближуються.

На рис. 5 для порівняння приведено хвильові функції основного стану електрона, взаємодіючого з додатним зарядом у великих та малих КТ разом з хвильовою функцією електрона, взаємодіючого з додатним зарядом у масивному напівпровідниковому кристалі та хвильовою функцією електрона у КТ без врахування кулонівської взаємодії. Як видно з рисунка у КТ з

радіусом $r_0 = 250a_{\text{HgS}}$ розмірне квантування є слабким і хвильова функція електрона у наносистемі збігається з хвильовою функцією електрона, взаємодіючого з додатним зарядом у масивному кристалі. У КТ з радіусом $r_0 = 15a_{\text{HgS}}$ кулонівська взаємодія є слабкою порівняно з потенціалом розмірного квантування і хвильова функція електрона збігається з хвильовою функцією квазічастинки у сферичній потенціальній ямі.

Розрахувавши енергію екситонного збудження за формулою

$$E_{\text{ex}} = E_{10}^{\text{ch}} + E_{10}^{\text{h}} + E_{\text{g}}, \quad (20)$$

де E_{10}^{ch} – енергія основного стану електрона, взаємодіючого з діркою, поміщеною у центр квантової точки; E_{10}^{h} – енергія основного стану дірки у квантовій точці; E_{g} – енергія забороненої зони напівпровідникового кристалу, виконаємо співставлення теоретичних та експериментальних результатів.

На рис. 6 приведено залежність розрахованої енергії екситонного збудження від розміру квантової точки CdS вміщеної в силікатне скло та експериментальних даних [13, 14]. Для кращої можливості порівняння теоретичних та експериментальних даних величина енергії

екситонного збудження приведена без величини ширини забороненої зони масивного кристала CdS. Рис.6 показує задовільну збіжність теоретичних та експериментальних значень енергії екситонного збудження.

Загальні висновки такі. Розроблена теорія домішкового електрона у КТ в середовищі з ефективною масою та діелектричними проникливостями, що є функціями відстані від центра системи у граничному випадку $m(r) = m$ та $\epsilon(r) = \epsilon$ збігається з відомою раніше [15]. Система хвильових функцій електрона адекватно описує експериментальну ситуацію внаслідок чого енергія локалізованого збудження, розрахована на основі приведеної теорії задовільно узгоджується з відомими експериментальними даними.

М.В. Ткач – доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри теоретичної фізики, ректор Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича;

В.А. Головацький – доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;

Я.М. Березовський – аспірант.

- [1] A. Di Carlo Organic and Inorganic Nanostructures: An Atomistic Point of View // *Pys.stat.sol.(b)*, **232**(1), pp. 5-12 (2001).
- [2] D. Schooss, A. Mews, A. Eychemuller, H.Weller. Quantum dot quantum well CdS/HgS/CdS: theory and experiment // *Phys. Rev. B*, II, **49**(24), pp. 17072-17078 (1994).
- [3] М.В. Ткач, В.А. Головацький, О.М. Войцехівська, М.Я. Мінькова Електронний спектр сферичної наногетеросистеми CdS/HgS/H₂O // *УФЖ*, **43**(5), сс. 617-622 (1998).
- [4] М.В. Ткач, В.А. Головацький, О.М. Войцехівська, М.Я. Міхальова, Р.Б. Фартушинський. Спектр електронів і дірок у сферичних наноструктурах // *Журнал фіз. досліджень*, **4**(3), сс. 342-349 (2000).
- [5] В.А. Головацький Електронний і дірковий спектри періодичних сферичних наногетероструктур з внутрішнім бар'єром // *Журнал фізичних досліджень*, **2**(4), сс. 583-585 (1998).
- [6] M. Tkach, V. Holovatsky, O. Voitsekhivska, M. Mykhalyova, R. Fartushynsky Electron-phonon interaction in semiconductor spherical quantum dot embedded into semiconductor medium (HgS/CdS) // *Phys. Stat. Sol.(b)*, **225**(2), pp. 331-342 (2001).
- [7] J.L. Marin, R. Riera, S.A. Cruz Confinement of excitons in spherical quantum dots // *J.Phys.: Cond. Mat.* **10**, pp. 1349-1361 (1998).
- [8] M. Tkach, V. Holovatsky, O. Voitsekhivska, M. Mikhalyova. Spectra of quasiparticles and their interaction in complicated spherical nanoheterosystems // *Narrow Gap Semiconductor. Proceeding of the IX Intern. Conf. Institute of Physics*, Humboldt University, Berlin, pp. 189-192 (2000).
- [9] С.И. Покутний Экситон в квазинульмерных структурах // *ФТТ*, **38**(2), сс.512-522 (1996).
- [10] A. Jeffrey, I. Ryzhik, I. Gradshteyn, Yu. Geronimus and M. Tseytlin. *Table of Integral*. Academic, Series and Products New York. 1059p. (1980).
- [11] G. Arfken. *Mathematical Methods for Physicist*. Academic, 2nd edn, New York, 639p. (1973).
- [12] A. Abramowich and I.A. Stegun. *Handbook of Mathematical Function with formulae, Graphs and Mathematical Tables*. DC: US GPO, Washington, 538p. (1964).
- [13] А.И. Екимов, А.А. Онущенко, А.Г. Плюхин, А.Л. Эфрос Размерное квантование экситонов и определение параметров их энергетического спектра в CuCl // *ЖЭТФ*, **88**(4), сс. 1490-1501 (1985).
- [14] J.L. Marin, R. Riera, S.A. Cruz. Confinement of excitons in spherical quantum dots// *J.Phys.: Cond. Mat.* **10**, pp. 1349-1361 (1998).

- [15] 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*, II, **58**(4), pp. 1954-1961 (1998).
- [16] И.С. Градштейн, И.М. Рыжик *Таблицы интегралов, сумм, рядов и производений*, Физматгиз, М., 1100 с. (1962).

M.V. Tkach, V.A. Holovatsky, Y.M. Berezovsky

Spectrum and wave Functions of the Hydrogenlike Impurity in the Spherical Quantum dot Embedded Into the Medium

The theory of the spectrum and wave functions of the impurity electron in spherical quantum dot (QD) with the different effective masses and dielectric constants in different media is developed for the first time. The exact solutions of Shrodinger equation correlate well with the experimental data for the localized impurity exciton in small quantum dots CdS embedded into silicate glass and also describe the spectrum of electron interacting with the donor impurity embedded into the center of quantum dot with arbitrary sizes. At is shown that for the rather big radius of the quantum dot the electron energy spectrum asymptotically limits to the hydrog enlike.