

УДК 538.958, 538.915

Лінійні та нелінійні оптичні властивості квантової точки з двома іонами донорних водневоподібних домішок

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

leshkoroman@mail.ru

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

Досліджено енергетичний спектр та хвильові функції квантової точки з двома діаметрально розташованими іонами домішок. Розглянуто випадок розташування домішок на поверхні квантової точки. Проведено обчислення енергії міжрівневих переходів, дипольного моменту та сил осциляторів переходів. Визначено лінійний коефіцієнт поглинання світла та дисперсію коефіцієнта заломлення світла як функції енергії падаючого кванта, розмірів квантової точки та положення домішок у ній.

1. Вступ

Найважливішими завданнями сучасної наноелектроніки є розроблення нових високопродуктивних приладів з покращеними параметрами. На сьогодні відомі схеми лазера інфрачервоного діапазону на основі внутрізонних переходів електронів у трирівневих квантових ямах та квантових точках (КТ) [1]. Внутрізонне поглинання світла також досліджено експериментально у [2-3]. Оскільки енергії міжрівневих переходів є набагато менші від міжзонних, то такі дослідження є важливими для побудови детекторів терагерцового випромінювання [4].

Усі властивості оптичних приладів, що сконструйовані як на основі масивних, так і нанорозмірних напівпровідників, вагомо залежать від наявності у них дефектів, зокрема домішок. Незважаючи на те, що на сьогодні розроблені технології, які дають змогу отримувати квантові точки (КТ) досить високої чистоти, однак ймовірність потрапляння домішок існує. До цього часу добре розвинуті теорії водневоподібних домішок у КТ [5-16]. Розглядалися сферичні [5-13], кубічні [14], еліпсоїдальні [15-16] КТ. Домішка розглядалася як у центрі [5-8], так і поза ним [11, 13, 15]. Побудовані теорії задовільно пояснюють властивості КТ з одною домішкою, на основі яких проведено обчислення оптичних параметрів КТ. Зокрема визначено коефіцієнт поглинання світла, відносний показник заломлення, що зумовлені міжрівневими переходами, і їх залежності від розмірів КТ, розташування домішки й енергії падаючого кванта світла [9, 11, 13-16].

Як показують експериментальні дані з одержання КТ на основі колоїдних розчинів, найчастіше домішка може потрапляти на поверхню КТ. У таких системах при великих концентраціях можливе потрапляння на КТ і 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 [17] запропоновано варіаційний метод та теорію збурень для обчислення енергії основного стану електрона у полі двох іонів домішок. Отримано залежності

енергії електрона від розташування домішок, побудовано графіки густини ймовірності. У цій роботі при обчисленнях одна домішка залишалася постійно у центрі. На нашу думку, доцільно ще провести обчислення у випадку віддалення двох домішок від центра, а також розглянути ці домішки на поверхні КТ. Крім того слід відзначити, що для обчислення оптичних міжрівневих переходів необхідно мати і збуджені стани електрона у цій же системі.

- визначення енергії та хвильових функцій електрона за наявності двох іонів водневоподібних домішок, що розташовані не у центрі КТ;
- визначення впливу розташування іонів домішок на оптичні властивості сферичної КТ;
- порівняння результатів з відповідними результатами задачі з однією нецентральною домішкою.

2. Теорія

Розглядається сферична наногетеросистема. Вона складається з нанокристала радіуса a з ефективною масою електрона m_1^* , який поміщений у матрицю, ефективна маса електрона в якій m_2^* . У цій наносистемі діаметрально протилежно на однаковій відстані D до центра КТ знаходяться два однакові однойменно заряджені іона донорної домішки. Систему координат вибрано так, що вісь z проходить через центр КТ та два іона домішок. Використовується метод ефективної маси. Гамільтоніан такої системи записано у вигляді:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla^2 \frac{1}{m^*} \nabla + \Pi(\mathbf{r}), \quad (1)$$

де потенціальна енергія $\Pi(\mathbf{r})$ є сумою

$$\Pi(\mathbf{r}) = U(r) + V(\mathbf{r}). \quad (2)$$

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

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

а потенціальну енергію взаємодії електрона з двома іонами домішок та іонами між собою записано

у формі кулонівських потенціалів:

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \left(\frac{w_a}{|\mathbf{R}_a - \mathbf{r}|} + \frac{w_b}{|\mathbf{R}_b - \mathbf{r}|} - \frac{w_{ab}}{|\mathbf{R}_a - \mathbf{R}_b|} \right), \quad (4)$$

де e — елементарний заряд, ϵ_0 — електрична стала, ϵ — середнє значення діелектричної проникності наносистеми, $\mathbf{R}_a = (0, 0, D)$, $\mathbf{R}_b = (0, 0, -D)$ — радіус-вектори розташування іонів домішок. Якщо

- $R_a = 0$, $w_a = 1$, $w_b = 0$, $w_{ab} = 0$, то запропонована задача зведеться до задачі про одну воднеподібну домішку у центрі КТ, розв'язки якої відомі [5–6];
- $R_a \neq 0$, $w_a = 1$, $w_b = 0$, $w_{ab} = 0$, то отримується модель однієї нецентральної домішки, яку досліджено у [13];
- $R_a \neq 0$, $R_b = 0$, $w_a = 1$, $w_b = 1$, $w_{ab} = 1$, то можна досліджувати модель двох іонів домішок у КТ, один з яких знаходиться у центрі. Така модель відповідає дослідженням основного стану електрона у роботі [17];
- $R_a \neq 0$, $R_b \neq 0$, $w_a = 1$, $w_b = 1$, $w_{ab} = 1$, то отримується загальніша модель, що описана вище, і яка досліджується у цій роботі.

Рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (1) точно розв'язати не можна. Тому для одержання розв'язку необхідно виконати деякі перетворення. У гамільтоніані (1) додано і віднято доданок, що відповідає за домішку у центрі КТ:

$$\hat{H} = \left(-\frac{\hbar^2}{2} \nabla^2 + U(r) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon r} \right) + \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon r} + V(r) \right) = \hat{H}^{(0)} + W(\mathbf{r}) \quad (5)$$

Рівняння Шредінгера з гамільтоніаном $\hat{H}^{(0)}$ (для центральної домішки) розв'язується точно:

$$\hat{H}^{(0)}\psi_{n,l,m}^{(0)} = E_{n,l}^{(0)}\psi_{n,l,m}^{(0)}, \quad (6)$$

$$\psi_{n,l,m}^{(0)} = R_{n,l}^{(0)}(r) Y_{l,m}^{(0)}(\theta, \varphi), \quad (7)$$

де $Y_{l,m}^{(0)}$ — сферичні функції, $R_{n,l}^{(0)}$ — радіальні хвильові функції, які можна подати за допомогою функцій Віттекера та Кулона [6, 13], n — номер розв'язку дисперсійного рівняння при фіксованому l . Застосовуючи граничні умови та умову нормування, знайдено енергетичний спектр домішки та невідомі коефіцієнти у хвильових функціях.

Хвильову функцію, що розв'язком рівняння Шредінгера з гамільтоніаном двох кулонівських центрів подано у вигляді розкладу за функціями $\hat{H}^{(0)}$:

$$\begin{aligned} \psi &= \sum_i c_{n,l,m} \psi_{n,l,m}^{(0)} = \\ &= \sum_i c_{n_i l_i m_i} \psi_{n_i l_i m_i}^{(0)} = \sum_i c_i \psi_i^{(0)}, \end{aligned} \quad (8)$$

де $\psi_{n_i l_i m_i}^{(0)}$ — хвильові функції центральної домішки, i — сукупність квантових чисел.

Підставляючи (8) у рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (5) та домножуючи одержане рівняння на ермітово спряжену функцію $(\psi_j^{(0)})^+$, отримано лінійну систему рівнянь відносно коефіцієнтів c_i :

$$\sum_i \left((E_i^{(0)} - E) \delta_{ij} + W_{ji} \right) c_i = 0, \quad (9)$$

з якої та умови нормування $\sum_i |c_i|^2 = 1$, знайдено енергетичний спектр та коефіцієнти розкладу.

Для розв'язання системи рівнянь (9) потрібно обчислити матричні елементи W .

$$W_{ij} = \langle n_i l_i m_i | W(r) | n_j l_j m_j \rangle = \langle n_i l_i m_i | V(r) | n_j l_j m_j \rangle +$$

$$\begin{aligned} &+ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \left\langle n_i l_i m_i \left| \frac{1}{r} \right| n_j l_j m_j \right\rangle \\ &= -\frac{e^2 w_a}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \left\langle n_i l_i m_i \left| \frac{1}{|\mathbf{R}_a - \mathbf{r}|} + \frac{1}{|\mathbf{R}_b - \mathbf{r}|} \right| n_j l_j m_j \right\rangle + \\ &+ \frac{e^2 w_{ab}}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \delta_{n_i l_i m_i; n_j l_j m_j} \left| \frac{1}{|\mathbf{R}_a - \mathbf{R}_b|} \right| + \\ &+ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \delta_{l_i m_i; l_j m_j} \left\langle n_i \left| \frac{1}{r} \right| n_j \right\rangle. \end{aligned} \quad (10)$$

Для обчислення першого доданку (10) було використано розклад у ряд за поліномами Лежандра:

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\mathbf{R}_a - \mathbf{r}|} + \frac{1}{|\mathbf{R}_b - \mathbf{r}|} &= \sum_{s=0}^{\infty} \left\{ \frac{r^s}{d^{s+1}} P_s(\cos \theta_1), \quad r < d, \right. \\ &+ \left. \frac{d^s}{r^{s+1}} P_s(\cos \theta_1), \quad r > d, \right. \\ &+ \sum_{g=0}^{\infty} \left\{ \frac{r^g}{d^{g+1}} P_g(\cos \theta_2), \quad r < d, \right. \\ &+ \left. \frac{d^g}{r^{g+1}} P_g(\cos \theta_2), \quad r > d. \right. \end{aligned}$$

Тут кути θ_1, θ_2 — кути між векторами $\mathbf{R}_a$ і $\mathbf{r}$ та $\mathbf{R}_b$ і $\mathbf{r}$ відповідно. Розглядається випадок, коли іони лежать на осі z , тому $\theta_1 = \theta$, $\theta_2 = \pi - \theta$. Оскільки $\cos \theta_2 = \cos(\pi - \theta) = -\cos(\theta)$, та $P_g(-\cos \theta) = (-1)^g P_g(\cos \theta)$, то отримано:

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\mathbf{R}_a - \mathbf{r}|} + \frac{1}{|\mathbf{R}_b - \mathbf{r}|} &= \\ &= \sum_{s=0}^{\infty} (w_a + w_b (-1)^s) \left\{ \frac{r^s}{d^{s+1}} P_s(\cos \theta), \quad r < d, \right. \\ &+ \left. \frac{d^s}{r^{s+1}} P_s(\cos \theta), \quad r > d. \right. \end{aligned} \quad (11)$$

Перший матричний елемент виразу (10) обчислено з врахуванням (11):

$$\begin{aligned} &\left\langle n_i l_i m_i \left| \frac{1}{|\mathbf{R}_a - \mathbf{r}|} + \frac{1}{|\mathbf{R}_b - \mathbf{r}|} \right| n_j l_j m_j \right\rangle = \\ &= \sum_{s=0}^{\infty} (w_a + w_b (-1)^s) I_{l_i, m_i; l_j, m_j} J_{n_i, l_i; n_j, l_j}, \end{aligned}$$

де інтеграл за радіальними змінними має вигляд:

$$J_{n_i, l_i; n_j, l_j} = \int_0^{\infty} r^2 dr R_{n_i l_i}^{(0)+} \cdot \begin{cases} \frac{r^s}{d^{s+1}}, & r < d \\ \frac{d^s}{r^{s+1}}, & r > d \end{cases} R_{n_j l_j}^{(0)},$$

а інтеграл за кутовими змінними вражено за допомогою коефіцієнтів Клебша-Жордана.

$$I_{l_i, m_i; l_j, m_j} = \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{l_i m_i}^+ P_s(\cos \theta) Y_{l_j m_j} =$$

$$= \frac{\sqrt{2l_j + 1}}{\sqrt{2l_i + 1}} \begin{bmatrix} l_j & s & l_i \\ m_j & 0 & m_i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_j & s & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Аналіз коефіцієнтів Клебша-Гордона показує, що ненульові значення будуть, якщо $|l_i - l_j| \leq s \leq l_i + l_j$, $m_i = m_j$. Таким чином,

$$\left\langle n_i l_i m_i \left| \frac{1}{|\mathbf{R}_a - \mathbf{r}|} + \frac{1}{|\mathbf{R}_b - \mathbf{r}|} \right| n_j l_j m_j \right\rangle =$$

$$= \sum_{s=|l_i - l_j|}^{l_i + l_j} (w_a + w_b (-1)^s) I_{l_i, m_i; l_j, m_j} J_{n_i, l_i; n_j, l_j}.$$

Як видно з формули, внесок даватимуть лише парні s . Нехай $p = 2s$. Отже, матричний елемент прийме вигляд

$$W_{ij} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \sum_{p=|l_i - l_j|}^{l_i + l_j} I_{l_i, m_i; l_j, m_j} J_{n_i, l_i; n_j, l_j} +$$

$$+ \frac{e^2 w_{ab}}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \delta_{n_i l_i m_i; n_j l_j m_j} \left| \frac{1}{|\mathbf{R}_a - \mathbf{R}_b|} \right| +$$

$$+ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \delta_{l_i m_i; l_j m_j} \left\langle n_i \left| \frac{1}{r} \right| n_j \right\rangle. \quad (12)$$

На основі поданих формул визначено енергетичний спектр системи. Обчислення проведено для гетеросистеми CdS/SiO_2 , параметри якої наступні: $m_1^* = 0.2m_0$, $m_2^* = 0.45m_0$, $\epsilon = (5.5 + 3.9)/2 = 4.7$, $U_0 = 2.7$ eV.

У центральному кулонівському полі у КТ існує нескінченне число зв'язаних станів, тобто маємо нескінченну суму в (8)–(9). Практично для досягнення потрібної збіжності треба брати скінченне число доданків, щоб досягнути потрібну збіжність результатів. Для цього було вибрано 5 значень орбітального квантового числа $l = 0, 1, 2, 3, 4$, для кожного з яких знайдено по 4 перших кореня дисперсійного рівняння n . Також врахувавши можливі значення магнітного квантового числа m , максимальне число доданків у розкладі становило 100. Було проведено обчислення значення енергії основного та 1-го збудженого станів системи з двома іонами домішок у залежності від кількості доданків у розкладі, для різних значень D/a при $a = 40$ Å. Встановлено, що для 84 і 100 доданків розкладу, величини енергій основного і збудженого станів вже не відрізняються у 4 значущій цифрі, що становить менше 0.7%. Таким чином зазначена кількість доданків є достатньою для обчислення енергії системи в високою точністю. У випадку $N = 1$ отримуються результати першого порядку

теорії збурень для основного стану. Звідси також випливає, що застосування теорії збурень є не адекватним.

Із зазначеною точністю було проведено обчислення енергії електрона у КТ за наявності двох позитивно заряджених іонів домішок. Зважаючи на те, що іони домішок розміщені на осі z , то у задачі зберігається циліндрична симетрія. Саме тому енергетичні рівні, які є вироджені за магнітним квантовим числом m у центральному сферично-симетричному полі, розщеплюються за $|m|$. На основі визначених коефіцієнтів розкладу, знайдені енергетичні рівні було посортовано та названо по значенню найбільшого коефіцієнта. Результати обчислень залежності енергії електрона у КТ від розташування домішок D/a подано на рис.1.

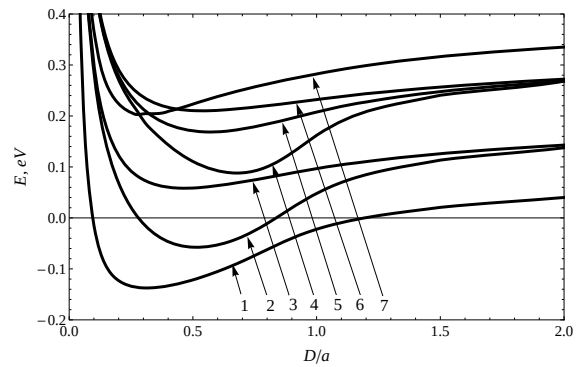


Рис. 1. Енергетичний спектр електрона у КТ з двома діаметрально розташованими іонами домішок. Радіус КТ $a = 40$ Å.

1 – 1S-подібний стан ($|m| = 0$), 2 – 1P-подібний стан ($|m| = 0$), 3 – 1P-подібний стан ($|m| = 1$), 4 – 1D-подібний стан ($|m| = 0$), 5 – 1D-подібний стан ($|m| = 1$), 6 – 1D-подібний стан ($|m| = 2$), 7 – 2S-подібний стан ($|m| = 0$)

З графіка видно, що при значному віддаленні домішок від центру, P-подібний та D-подібний енергетичні рівні, що є розщепленими за магнітним квантовим числом знову вироджуються, тобто криві 2 і 3 та криві 4, 5, 6 наближаються одна до одної відповідно. Це свідчить про те, що максимум густини ймовірності електрона, при значному віддаленні домішок від центра КТ внаслідок сильного просторового обмеження, припадає на центр КТ (рис.2). Тобто енергія прямує до енергії КТ без домішок. Для малих зміщень домішки зазначені енергетичні рівні знову вироджуються. Така ж якісно схожа залежність енергетичних рівнів отримана і для однієї домішки у роботі [13]. У граничному випадку коли $D \rightarrow 0$, можна покласти, що $w_{ab} = 0$ і отримати результати, що відповідають випадку заряду іона домішки $q = 2e$, який поміщений у центрі КТ. На рис.2 також подано графіки розподілу густини ймовірності для основного стану при $a = 40$ Å для різних D/a .

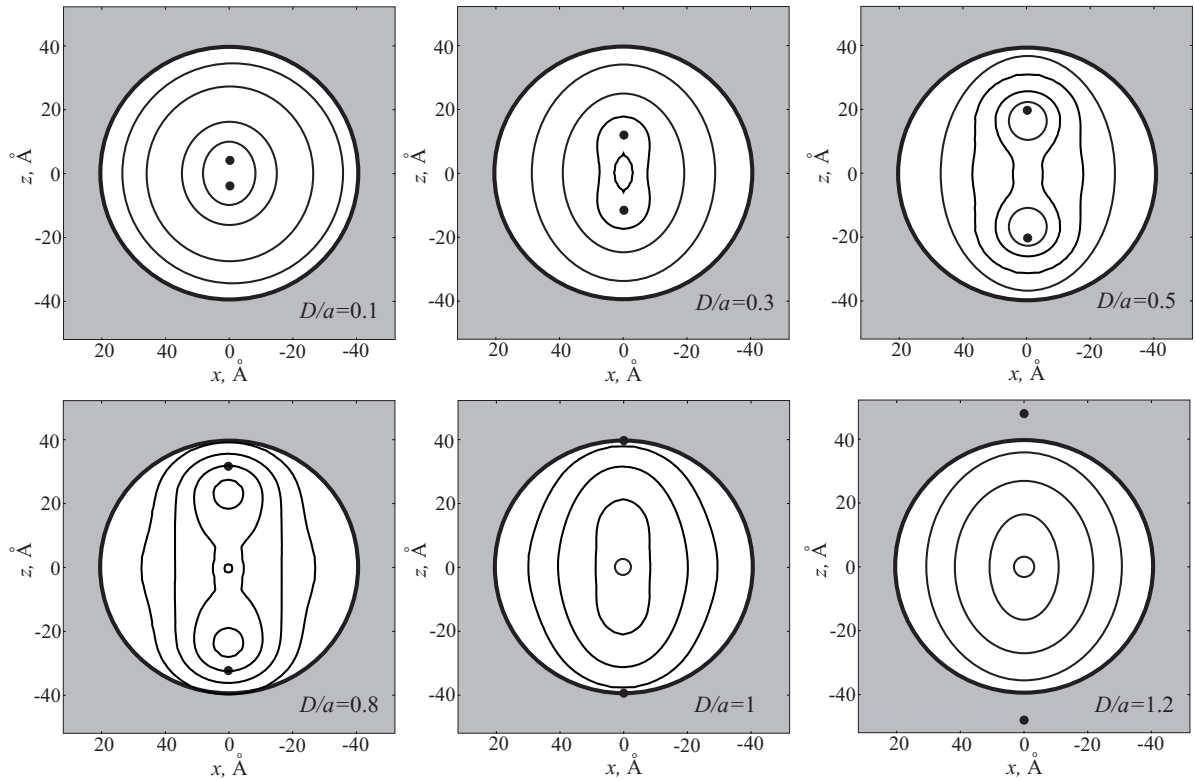


Рис. 2. Розподіл густини ймовірності перебування електрона у КТ з двома іонами домішок. Точками позначено розташування іонів. Радіус КТ $a = 40$ Å.

3. Оптичні властивості

Оптичні властивості КТ з двома іонами водневоподібних домішок обчислено з використанням хвильових функцій (8). Розглядається випадок коли КТ опромінюється лінійно поляризованим світлом, що падає на КТ вздовж осі z (напрямку, по якому зміщується іони домішок від центра). Розглядається дипольне наближення для міжрівневих переходів з основного у перший збуджений стан. Для дворівневої системи дипольний момент переходу можна подати у вигляді:

$$\begin{aligned} d_{1S,1P} &= \langle 1P | ez | 1S \rangle = \\ &= \int d\mathbf{r} \sum_i \left(c_i^{(1P)} \psi_i^0 \right)^+ ez \sum_j c_j^{(1S)} \psi_j^0 = \\ &= \sum_{i,j} \left(c_i^{(1P)} \right)^+ \left[\int d\mathbf{r} (\psi_i^0)^+ ez \psi_j^0 \right] c_j^{(1S)} = \\ &= \sum_{i,j} \left(c_i^{(1P)} \right)^+ d_{i,j}^{(0)} c_j^{(1S)}, \end{aligned} \quad (13)$$

де $d_{i,j}^{(0)}$ — матричний елемент дипольного моменту на хвильових функціях $\psi_i^{(0)}$. Силу осцилятора міжрівневого переходів між 1S- та 1P-подібними станами знайдено за формулою:

$$F_{1S-1P} = \frac{2m_1^*}{e^2 \hbar^2} (E_{1P} - E_{1S}) |d_{1S,1P}|^2 \quad (14)$$

Коефіцієнт поглинання світла, що зумовлений міжрівневим переходом з основного стану у перший збуджений стан, визначено на основі формул з [12, 16]:

$$\alpha(\omega, I) = \alpha^{(lin)}(\omega) + \alpha^{(nonlin)}(\omega, I), \quad (15)$$

де перший доданок описує лінійний коефіцієнт поглинання світла:

$$\alpha^{(lin)}(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0 \epsilon}} \frac{\sigma |d_{1S,1P}|^2 \hbar \Gamma_{1,2}}{(E_{1P} - E_{1S} - \hbar \omega)^2 + (\hbar \Gamma_{1,2})^2}, \quad (16)$$

а другий - нелінійний, третього порядку, що залежить від інтенсивності світла:

$$\begin{aligned} \alpha^{(nonlin)}(\omega) &= -\omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0 \epsilon}} \left(\frac{I}{2\epsilon_0 \sqrt{\epsilon} c} \right) \frac{\sigma |d_{1S,1P}|^2 \hbar \Gamma_{1S,1P}}{(E_{1P} - E_{1S} - \hbar \omega)^2 + (\hbar \Gamma_{1S,1P})^2} \times \\ &\left(4|d_{1S,1P}|^2 - \frac{(d_{1P,1P} - d_{1S,1S})^2 \left(3(E_{1P} - E_{1S})^2 - 4(E_{1P} - E_{1S}) \hbar \omega + \hbar^2 \omega^2 - \hbar^2 \Gamma_{1S,1P}^2 \right)}{(E_{1P} - E_{1S})^2 + \hbar^2 \Gamma_{1S,1P}^2} \right), \end{aligned} \quad (17)$$

де c — швидкість світла, $\hbar\Gamma_{1S,1P}$ — енергія релаксації, що зумовлена електрон-фононою взаємодією та іншими факторами розсіювання. Вважаємо, що КТ знаходиться при низьких температурах, поверхня її є ідеальною, тому параметр $\hbar\Gamma_{1S,1P}$ можна оцінити як ширину енергетичних рівнів, величина яких зумовлена розсіюванням на акустичних фононах. Якщо розглянути температуру системи $T = 20$ К, то $\hbar\Gamma_{1S,1P} \sim 1.7$ еВ. Густина зарядів у КТ σ вибрано на основі припущення, що у КТ може знаходитись лише 1 електрон (домішковий електрон), тому $\sigma = 3/(4\pi a^3)$.

Окрім зазначених оптичних параметрів, важливою характеристикою міжрівневих переходів є енергія переходу $E_{tr} = E_{1P} - E_{1S}$. Залежність цієї величини від розташування двох іонів домішок подано на рис.3.

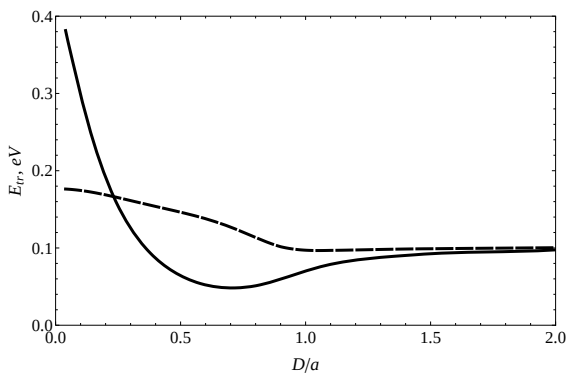


Рис. 3. Енергія переходу електрона з основного стану у перший збуджений. Штрихова крива відповідає наявності одного іона домішки, суцільна — двох. Радіус КТ $a = 40$ Å.

На рисунку також подано енергію переходу для випадку одного іона домішки, що отримано на основі результатів роботи [13]. На відміну від наявності одного іона домішки два іона домішок призводять до немонотонної залежності енергії переходу, що зумовлена зближенням та віддаленням енергетичних рівнів 1S- та 1P-подібних станів. Для обох випадків (один та два іона домішок) віддалення домішок від центра веде наближення енергій переходу до значення $E_{tr} = 0.1016$ еВ, яке відповідає енергії переходу з основного у перший збуджений стан у КТ без домішок. Аналогічна ситуація має місце для матричного елемента дипольного моменту міжрівневих переходів (рис.4) та сили осцилятора переходу (рис.5). З графіків сил осциляторів переходу видно наявність немонотонних залежностей від D/a , які можна пояснити немонотонною залежністю дипольного моменту міжрівневих переходів, що в свою чергу зумовлений зміною просторового розташування електрона при зміні розташування іонів водневподібних донорних домішок (рис.6).

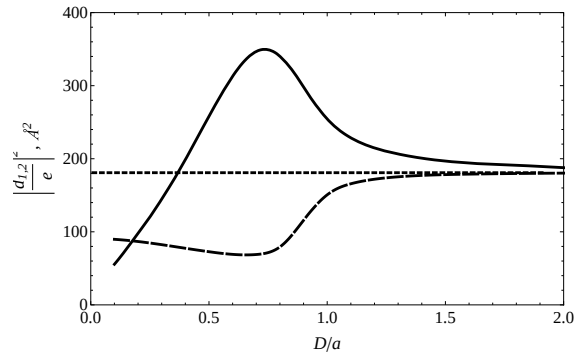


Рис. 4. Дипольний момент міжрівневих переходів у КТ з одним (штрихова крива) та двома (суцільна крива) іонами домішок. Горизонтальна пунктирна крива відповідає випадку відсутності іонів домішок. Радіус КТ $a = 40$ Å.

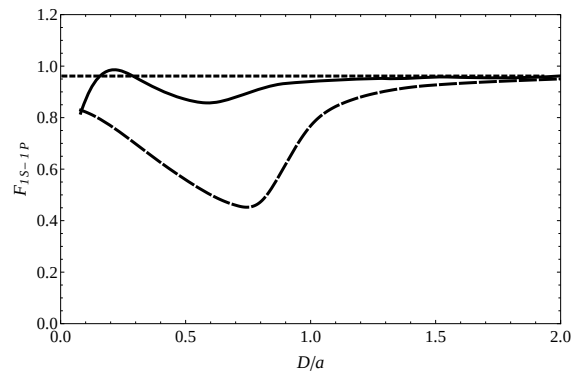


Рис. 5. Сила осцилятора міжрівневих переходів у КТ з одним (штрихова крива) та двома (суцільна крива) іонами домішок. Горизонтальна пунктирна крива відповідає випадку відсутності іонів домішок. Радіус КТ $a = 40$ Å.

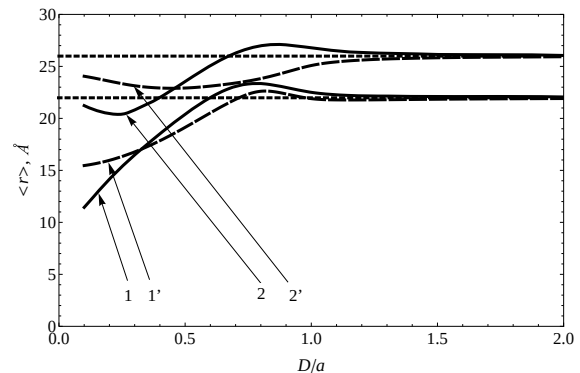


Рис. 6. Середні відстані електрона до центра КТ з одним іоном (штрихові криві) та двома іонами (суцільні криві) домішок.

Криві 1, 1' — 1S-подібні; 2, 2' — 1P-подібні стани. Нижня горизонтальна пунктирна лінія — 1S-стан без іонів домішок, верхня — 1P-стан без іонів домішок. Радіус КТ $a = 40$ Å.

З рис.6 видно, що середня відстань електрона в основному стані є найближчою до середньої відстані електрона у збудженому стані при $D/a \approx 0.7$ за наявності одного іона домішки. Саме тому у цій же точці спостерігається мінімум у залежності $F_{1S,1P}$ від D/a . У цій же точці для випадку двох іонів домішок є максимум $F_{1S,1P}$ від D/a , бо

у цій точці різниця середніх відстаней у цих станах є найбільшою. Подальше збільшення D/a веде до того, що сила осцилятора в обох випадках (один чи два іона домішки) прямує до відповідних величин, які можна одержати у задачі про електрон у сферичній КТ без іонів домішок.

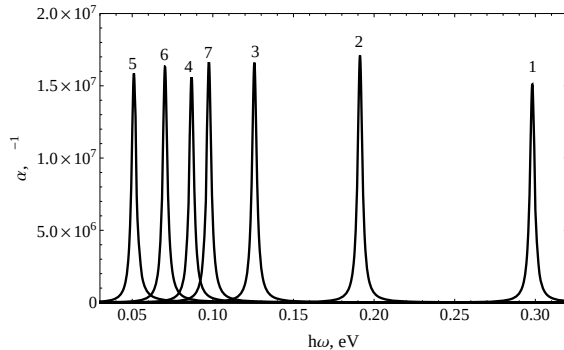


Рис. 7. Лінійний коефіцієнт поглинання світла КТ з двома іонами домішок. Крива 1 відповідає зміщенню іонів домішок на $D/a = 0.1$; 2 — $D/a = 0.2$; 3 — $D/a = 0.3$; 4 — $D/a = 0.4$; 5 — $D/a = 0.8$; 6 — $D/a = 1$; 7 — $D/a = 2$. Радіус КТ $a = 40$ Å.

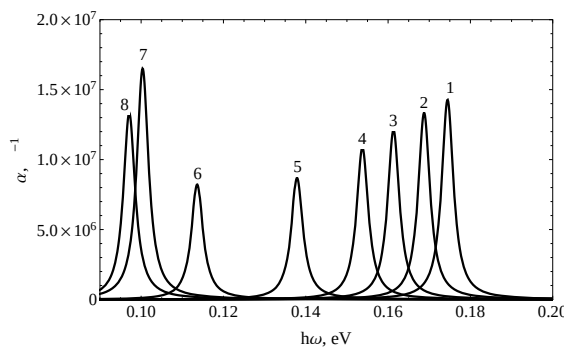


Рис. 8. Лінійний коефіцієнт поглинання світла КТ з одним іоном домішки. Крива 1 відповідає зміщенню іонів домішок на $D/a = 0.1$; 2 — $D/a = 0.2$; 3 — $D/a = 0.3$; 4 — $D/a = 0.4$; 5 — $D/a = 0.6$; 6 — $D/a = 0.8$; 7 — $D/a = 1$; 8 — $D/a = 2$. Радіус КТ $a = 40$ Å.

Зазначена залежність дипольного моменту та сили осцилятора переходу відобразиться на висоті піків смуг поглинання (рис. 7, 8). Встановлено, що у КТ з одним іоном домішки його віддалення від центра КТ викликає зміщення піку поглинання у низькоенергетичну область (рис. 8). Спостерігається зменшення висоти піку поглинання, якщо D/a збільшується до 0.7. Подальше збільшення D/a веде знову до зростання висоти піку поглинання і до уповільнення його швидкості зміщення в низькоенергетичну область. Якщо ж іон домішки знаходиться на значних відстанях від КТ, то його вплив зникає, а смуга поглинання відповідає міжрізновому поглинанню сферичної КТ без домішки. Для випадку двох домішок (рис. 7) при їх віддаленні від центра, спочатку смуги поглинання зміщуються в низькоенергетичну область поки $D/a < 0.8$, а далі при зростанні D/a — у високоенергетичну. Для великих D/a смуги поглинання

відповідають смугам поглинання КТ без домішки. Розташування цих смуг поглинання і визначається енергією переходу (рис. 3). Діапазон зміщень смуг поглинання при зміні розташувань домішок для випадку двох іонів є більшим, ніж для одного іона. Причиною такої залежності є те, що величина максимальної та мінімальної енергії E_{tr} для двох іонів домішок є більша, ніж для одного. Крім того слід зазначити, що внаслідок незначної зміни сили осцилятора переходу для КТ з двома іонами домішок від їх розташування (рис. 5) висота смуг поглинання також змінюється незначно, порівняно з випадком однієї домішки. Такий зв'язок сили осцилятора та коефіцієнта поглинання зумовлений тим, що криві поглинання мають залежність типу Лоренцової кривої, а площа під цією кривою пропорційна силі осцилятора.

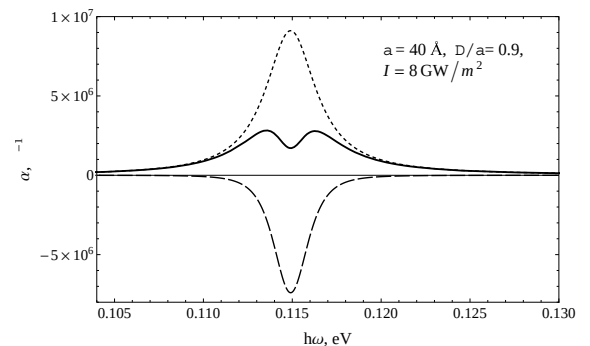


Рис. 9. Лінійний (пунктирна), нелінійний (штрихова) та сумарний (суцільна) коефіцієнт поглинання світла КТ з одним іоном домішки

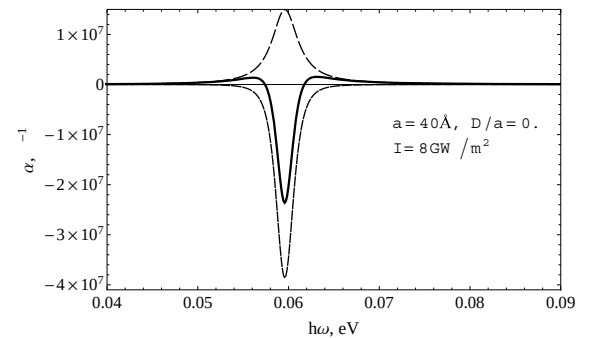


Рис. 10. Лінійний (пунктирна), нелінійний (штрихова) та сумарний (суцільна) коефіцієнт поглинання світла КТ з двома іонами домішки

Вище описані оптичні властивості стосуються КТ, що опромінюються світлом при малих інтенсивностях. Якщо ж інтенсивність світла збільшувати, то спостерігатимуться нелінійні ефекти. На рис.9 показано залежність коефіцієнта поглинання світла від енергії падаючого кванта у випадку наявності одного іона домішки при значній інтенсивності світла. Як видно з рис.10 наявність ще одного іона домішки у КТ приведе до посилення нелінійних ефектів. А зменшення інтенсивності почне їх послаблювати. Наприклад, при $I = 1$ ГВт/м² нелінійні ефекти для КТ з двома

іонами домішок значно послаблюються, а з одним іоном домішки — практично не спостерігаються.

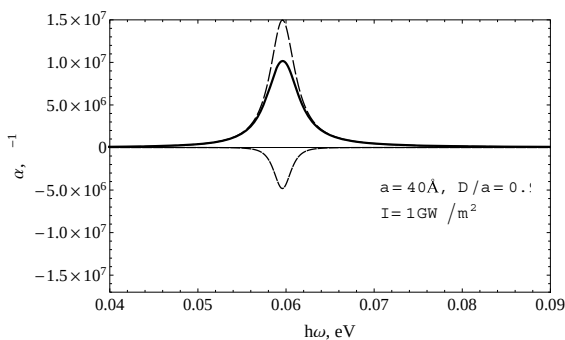


Рис. 11. Лінійний (пунктирна), нелінійний (штрихова) та сумарний (суцільна) коефіцієнт поглинання світла КТ з двома іонами домішки

4. Висновки

Отже, у роботі проведено теоретичне дослідження домішок у КТ дало змогу:

- визначити енергії та хвильових функцій електрона за наявності двох іонів водневоподібних домішок, що розташовані і не у центрі КТ, обґрунтувати точність обчислень;

- показати, що у випадку діаметрального розташування іонів домішок енергетичні рівні розщеплюються за модулем магнітного квантового числа $|m|$;
- встановити, що для великих зміщень домішок енергія системи прямує до енергії КТ без домішок;
- визначити, що зміщення двох іонів домішок від центра веде до зміщення смуг поглинання у низькоенергетичну область (поки $D/a < 0.8$), а далі знову у високоенергетичну;
- отримати, що наявність двох іонів домішок веде до ширшого діапазону зміни значень енергій міжрівневих переходів порівняно з випадком одного іона домішки;
- показати, що для значних зміщень іонів домішок отримано результати задачі про КТ без домішок;
- довести, що отримані результати переходять у результати задачі про одну домішку з роботи [13], якщо в обчисленнях з потенціальної енергії виключити два доданки, що відповідають за кулонівську взаємодію домішок та за взаємодію електрона з другою домішкою.

Бібліографія

- [1] A. Kastalsky, L.E. Vorobjev, D.A. Firsov, V.L. Zerova, E. Towe. A dual-color injection laser based on intra- and inter-band carrier transitions in semiconductor quantum wells or quantum dots // IEEE Journal of Quantum Electronics. — 2001. — **37**, № 10. — P. 1356–1362.
- [2] Л.Е. Воробьев, В.Ю. Паневин, Н.К. Федосов, Д.А. Фирсов, В.А. Шалыгин, S. Hanna, A. Seilmeier, Kh. Moumanis, F. Julien, А.Е. Жуков, В.М. Устинов. Внутризонное поглощение и излучение света в квантовых ямах и квантовых точках. // ФТТ. — 2004. — **46**, № 1. — С. 119–112.
- [3] Л.Е. Воробьев, В.Ю. Паневин, Н.К. Федосов, Д.А. Фирсов, В.А. Шалыгин, A.D. Andreev, Ю.Б. Самсоненко, А.А. Тонких, Г.Э. Цырлин, Н.В. Крыжановская, В.М. Устинов, S. Hanna, A. Seilmeier, N.D. Zakharov, P. Werner. Оптические явления в гетероструктурах *InAs/GaAs* с легированными квантовыми точками и искусственными молекулами. // ФТП. — 2005. — **39**, № 1. — С. 59–62.
- [4] Wei Wu, Dibyendu Dey and Hooman Mohseni. A voltage tunable quantum dot photodetector for terahertz detection // J. Phys. D. — 2010. — **43**. P. 155101(6 pages).
- [5] C.-C. Yang, L.-C. Liu, and S.-H. Chang. Eigenstates and fine structure of a hydrogenic impurity in a spherical quantum dot // Phys. Rev. B. — 1998. — **58**, № 4. — P. 1954–1961.
- [6] Ткач М.В., Головацький В.А., Березовський Я.М. Спектр і хвильові функції водневоподібної домішки, розміщеної в центрі квантової точки // Фіз. і хім. тверд. тіла. — 2003. — **4**, № 2. — P. 213–220.
- [7] Shu-Shen Li, Jian-Bai Xia. Electronic states of a hydrogenic donor impurity in semiconductor nano-structures // Phys. Lett. A. — 2007. — **366**, № 1–2. — P. 120–123.
- [8] Boichuk V.I., Bilynskyi I.V., Leshko R.Ya. The effect of polarization charges on energy of univalent and bivalent donors in a spherical quantum dot // Condensed Matter Physics. — 2008. — **11**, № 4. — P. 653–661.
- [9] M.R.K. Vahdani, G. Rezaei. Linear and nonlinear optical properties of a hydrogenic donor in lens-shaped quantum dots // Physics Letters A. — 2009. — **373**, /No 34. P. 3079–3084.
- [10] Nasria D., and Sekkal N. General properties of confined hydrogenic impurities in spherical quantum dots // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. — 2010. — **42**, № 9. — P. 2257–2263.
- [11] W. Xie. Optical properties of an off-center hydrogenic impurity in a spherical quantum dot with Gaussian potential // Superlattices and Microstructures. — 2010. — **48**, № 2. — P. 239–247.
- [12] Xie W. Impurity effects on optical property of a spherical quantum dot in the presence of an electric field // Physica B: Condensed Matter. — 2010. — **405**, № 16. — P. 3436–3440.
- [13] Boichuk V.I., Bilynskyi I.V., Leshko R.Ya., Turyanska L.M. The effect of the polarization charges on the optical properties of a spherical quantum dot with an off-central hydrogenic impurity // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. — 2011. — **44**, № 2. — P. 476–482.

- [14] Shu-Shen Li, Jian-Bai Xia. Electronic states of a hydrogenic donor impurity in semiconductor nano-structures // Phys. Lett. A. — 2007. — **366**, № 1–2. — P. 120–123.
- [15] Sadeghi E., and Avazpour A. Binding energy of an off-center donor impurity in ellipsoidal quantum dot with parabolic confinement potential // Physica B: Condensed Matter. — 2011. — **406**, № 2. — P. 241–244.
- [16] Rezaei G., Vahdani M.R.K., and Vaseghi B. Nonlinear optical properties of a hydrogenic impurity in an ellipsoidal finite potential quantum dot // Current Applied Physics. — 2011. — **11**, № 2. — P. 176–181.
- [17] В.А. Головацький, І.Б. Франків. Енергії та хвильові функції електрона у сферичній квантовій точці CdS/SiO_2 з однією та двома водневоподібними домішками // Журнал фізичних досліджень. — 2012. — **16**, № 1/2. — С. 1706(1)–1706(9).