

Мілкі домішкові центри у квазінульвимірних наногетеросистемах

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

email: leshkoroman@gmail.com

кафедра теоретичної фізики

Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка
вул. Стрийська, 3, Дрогобич, Львівська обл., 82100

Проведено огляд наукових робіт, що присвячені домішковим центрам у квантових точках, Описано їх структуру енергетичних рівнів і їх залежність від розмірів наносистеми. Проаналізовано сучасний стан зазначеної проблематики.

Ключові слова: домішки акцепторна та донорна, квантова точка.

ВСТУП

Важливим завданням сучасних матеріалознавців і технологів є пошук нових матеріалів, що можуть бути застосовані в нанoeлектроніці. Найбільш продуктивним шляхом у цьому напрямку є використання гетеросистем з різними нанооб'єктами: квантовими точками (КТ), квантовими дротами (КД), квантовими ямами (КЯ) та їх поєднання.

На основі наноструктур функціонує велика кількість різноманітних електронних, оптичних, оптоелектронних приладів, джерел білого світла, сонячні батареї та висококогерентні лазери. Основною характеристикою таких приладів є їхня висока продуктивність при малих енергозатратах.

З усіх нанооб'єктів на особливу увагу заслуговують КТ, бо вони мають властивості, які притаманні штучним атомам і характеризуються дискретним (квазідискретним) спектром квазічастинок, тому є дуже перспективними квазінульвимірними об'єктами, на основі яких можуть бути сконструйовані високоефективні електронні та оптоелектронні прилади.

Оптичні характеристики напівпровідників (інтенсивності випромінювання, коефіцієнти поглинання, часи релаксації) залежать від різних дефектів кристалічної ґратки. Кожне порушення ідеальної структури утворює додаткове поле, яке впливає на

поведінку зарядів. Зокрема, просторове обмеження зарядів і наявність домішок може кардинально змінювати властивості як масивних кристалів, так і нанокристалів.

Основним завданням фізиків-теоретиків та фізиків-експериментаторів є розроблення ефективних моделей для прогнозування і керування властивостями КТ, виявлення та фіксація цих властивостей, а також розробка технологій, що дадуть змогу отримувати задані об'єкти високої якості із наперед визначеними характеристиками.

Відомо, що КТ можна отримати досить високої якості, але це не гарантує відсутність в них різних дефектів кристалічної структури. В окрему КТ може потрапити хоча б один домішковий атом. Також домішковий атом може пасивувати обірвані зв'язки на поверхні КТ. З іншого боку, домішка може потрапити в систему через легування. Тому так чи інакше КТ може містити домішки, які впливатимуть на її фізичні властивості, зокрема і оптичні.

Найбільш простими та інформативними методами, які дають змогу на практиці дослідити електронну структуру КТ є експерименти з поглинання і фотолюмінесценції. Саме з ці дані є базою, на основі якої перевіряють теоретичні моделі, що стосуються зонної структури КТ та теорії лінійного і нелінійного поглинання електромагнітних хвиль.

Запропонований короткий огляд має на меті описати сучасний стан досліджень КТ з

мілкими домішковими центрами, проаналізувати проблеми і перспективи.

1. ДОМІШКОВІ СТАНИ У КТ

Як правило, оптичні властивості напівпровідників при низьких температурах визначають домішки. Їхня наявність у низькорозмірних структурах також вплине на властивості цих систем. Зокрема слід відзначити, що різні типи домішкових атомів приведуть до кардинально протилежної зміни властивостей КТ.

Загалом потенціал домішкового центру умовно можна розділити на далекодіючий (кулонівський і кулонопобібні потенціали), який відповідає за мілкі домішки (донорні та акцепторні) та короткодійний, що включає хімічне розрізнення домішкових і «рідних» атомів, а також деформацію ґратки внаслідок введення стороннього атома.

Традиційно прийнято називати мілкою донорною домішкою таку, що має енергетичні рівні, що розташовані у забороненій зоні масивного напівпровідника і близькі до дна зони провідності. Відповідно мілка акцепторна домішка має енергетичні рівні, що розташовані у забороненій зоні масивного напівпровідника та близькі до вершини валентної зони. Однак розташування цих рівнів може змінюватися у наносистемах при зміні їх розмірів. Тому домішку називатимемо мілкою, якщо потенціал, яким вона моделюється, повільно змінюється в межах елементарної комірки, а також енергія зв'язку є малою порівняно з величиною забороненої зони [1].

Для мілких домішкових центрів часто застосовується ефективна модель воднево-подібного атома та наближення ефективної маси.

У залежності від валентності стороннього атома будуть або донорні, або акцепторні домішки. Значна частина дослідників [2-17] моделює взаємодію електрона з іоном домішки у вигляді кулонівської потенціальної енергії взаємодії зарядів у однорідному середовищі з діелектричною проникністю ϵ

$$V(r) = -\frac{e^2}{\epsilon r}. \quad (1)$$

Введення діелектричної проникності можна вважати правильним, якщо радіус домішкового стану набагато більший від

сталої ґратки. Оскільки домішковий центр нерухомий, то під ϵ розуміють статичну діелектричну проникність. Така потенціальна енергія взаємодії йона домішки з електроном повністю виключає з опису всі індивідуальні характеристики домішки, що пов'язані з її хімічною природою. Тому в такому наближенні енергетичні рівні всіх домішок у заданому кристалі будуть однаковими, але властивості домішок у гетероструктурах сильно залежатимуть від їх параметрів і навпаки.

У загальному випадку діелектрична проникність для наногетероструктур є різною, тобто залежить від координат. Тому для послідовного врахування різниці між діелектричними проникностями нанооб'єкта і матриці необхідно розв'язати рівняння Пуассона. У роботах [17-20] для заряджених частинок розв'язано рівняння Пуассона, і основі цих розв'язків визначено енергію взаємодії електрона і дірки з поляризаційними зарядами, що виникають на гетеромежах з врахуванням існування перехідного шару, де діелектрична проникність залежить від координати, так і без його врахування. Визначено вплив поляризаційних зарядів на межах поділу середовищ на екситонні та поверхневі стани наногетеросистеми.

1.1. Донорні домішки

Для визначення спектру донорних домішок у наближенні однозонної параболічної моделі зони провідності вводиться ефективна маса і одночастинкові стани визначаються шляхом розв'язання хвильового рівняння Шредінгера з відповідною ефективною масою. У такому наближенні часто розв'язується відповідне рівняння Шредінгера для КТ.

Розглядається сферична наногетеросистема. Вона складається з нанокристала радіуса a , діелектрична проникність якого ϵ_1 , а ефективна маса електрона m^* , який поміщений у матрицю з діелектричною проникністю ϵ_2 і ефективною масою електрона в ній m_1^* . У цій сферичній КТ знаходиться донорна домішка на відстані D від центра. Систему координат вибрано так, що вісь z проходить через центр КТ та домішку.

Гамільтоніан такої системи записано у вигляді:

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

де потенціальна енергія є сумою:

$$\Pi(\vec{r}) = U(r) + W(\vec{D}, \vec{r}) + V_p(r). \quad (3)$$

Тут потенціальна енергія, що зумовлена розривом зон гетероструктури, така:

$$W(\vec{D}, \vec{r}) = -e^2 \begin{cases} \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n+1}{\varepsilon_1 n + \varepsilon_2 (n+1)} \frac{D^n r^n}{a^{2n+1}} P_n(\cos(\theta)) + \frac{1}{\varepsilon_1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{r^n}{D^{n+1}} P_n(\cos(\theta)), & D < a, r < a, r < D, \\ \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n+1}{\varepsilon_1 n + \varepsilon_2 (n+1)} \frac{D^n r^n}{a^{2n+1}} P_n(\cos(\theta)) + \frac{1}{\varepsilon_1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{D^n}{r^{n+1}} P_n(\cos(\theta)), & D < a, r < a, D < r, \\ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{\varepsilon_1 n + \varepsilon_2 (n+1)} \frac{D^n}{r^{n+1}} P_n(\cos(\theta)), & D < a, r > a, \\ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{\varepsilon_1 n + \varepsilon_2 (n+1)} \frac{r^n}{D^{n+1}} P_n(\cos(\theta)), & D > a, r < a, \\ \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n}{\varepsilon_1 n + \varepsilon_2 (n+1)} \frac{a^{2n+1}}{D^{n+1} r^{n+1}} P_n(\cos(\theta)) + \frac{1}{\varepsilon_2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{r^n}{D^{n+1}} P_n(\cos(\theta)), & D > a, r > a, r < D, \\ \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n}{\varepsilon_1 n + \varepsilon_2 (n+1)} \frac{a^{2n+1}}{D^{n+1} r^{n+1}} P_n(\cos(\theta)) + \frac{1}{\varepsilon_2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{D^n}{r^{n+1}} P_n(\cos(\theta)), & D > a, r > a, D < r, \end{cases} \quad (5)$$

де $P_n(x)$ – поліноми Лежандра, θ – кут між радіус вектором та віссю z . У випадку, коли іон домішки знаходиться у центрі ($D=0$), вираз (5) зведеться до вигляду:

$$W(\vec{r}, 0) = V(r) = -e^2 \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon_1 r} + \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 a}, & r \leq a, \\ \frac{1}{\varepsilon_2 r}, & r > a. \end{cases} \quad (6)$$

Потенціальна енергія взаємодії електрона з поляризаційними зарядами, які цей електрон сам індукує (потенціал самодії), визначається формулою:

$$V_p(r) = \begin{cases} \frac{e^2 \eta}{2a\varepsilon_1} \left[\frac{a^2}{a^2 - r^2} + \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} F\left(1, \lambda; \lambda + 1; \left(\frac{r}{a}\right)^2\right) \right], & r < a, \\ \frac{e^2 \eta}{2a\varepsilon_2} \left[\frac{a^2}{a^2 - r^2} + \left(\frac{a}{r}\right)^2 F\left(1, \lambda; \lambda + 1; \left(\frac{a}{r}\right)^2\right) \right], & r > a, \end{cases} \quad (7)$$

де

$$\lambda = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}, \quad \eta = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2},$$

де $F(a, b, c; x)$ – узагальнена гіпергеометрична функція.

Сформульована задача була послідовно розв'язана у роботі [21] варіаційним методом та методом розкладу по повній системі функцій. Якщо у формулах (5)-(7) діелектричні проникності замінити їх середнім значенням, то зникають усі поляризаційні поправки до енергії системи. Якщо ж $D=0$, то відповідна задача

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a, \\ U_0, & r > a, \end{cases} \quad (4)$$

потенціальна енергія взаємодії електрона з йоном домішки, що одержана на основі розв'язку рівняння Пуассона і яка враховує взаємодію електрона з поляризаційними зарядами, зумовленими йоном домішки, виражається так [18-20]:

перетворюється задачу про центральну домішку, яка вичерпно розв'язана у роботах [10-11].

На прикладі гетеросистеми CdS/SiO_2 у випадку центральної домішки знайдено точні розв'язки зазначеної задачі, а вплив поляризаційних зарядів визначено на основі теорії збурень. Результати обчислень подано на рис.1 [21]. З рисунка видно, що врахування потенціалів (6) та (7) у сумі приводить до збільшення енергії для будь-якого значення a . Потенціал самодії збільшує енергію домішки, а потенціал (6) – зменшує її. Для основного стану існує важлива особливість у залежності енергії від радіуса КТ – мінімум. Його наявність зумовлена конкуруванням двох факторів: просторового обмеження, яке збільшує енергію, та зростання глибини ефективної потенціальної ями, що залежить від доданку

$$V_0(a) = -e^2 (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) / (\varepsilon_1 \varepsilon_2 a)$$

з (6), яке зменшує енергію. Аналогічні мінімуми існують і для збуджених станів, однак вони менш чіткі і зміщені у сторону зростання радіуса КТ. Наприклад, енергія 2Р-стану має мінімум при $a \approx 170 \text{ \AA}$. Вводячи середнє значення діелектричної проникності, ми нехтуємо усіма поляризаційними поправками, тому мінімум у залежності не спостерігається (штрихові лінії).

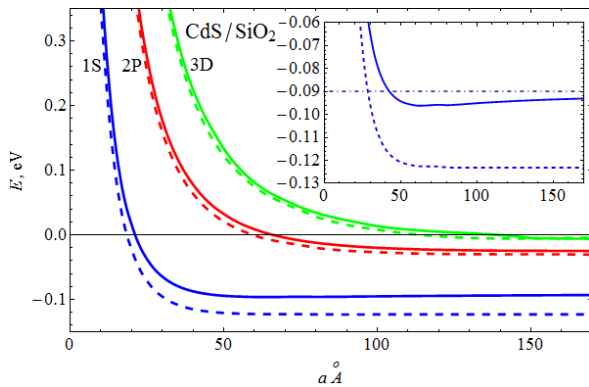


Рисунок 1. Енергія основного (1S) та збуджених (2P, 3D) станів центральної домішки у сферичній КТ. Штрихові лінії позначають енергію без врахування поляризаційних зарядів (коли використовується середнє значення діелектричних проникностей $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_{\text{average}}$), суцільні криві – з врахуванням.

Нехтуючи поляризаційними зарядами, спектр та хвильові функції знайдено у роботі [11] для КТ гетеросистеми HgS/CdS . Розв'язки подано функціями Кулона та Віттекера. Встановлено, коли радіус нанокристалу дуже великий, то потенціал обмеження здійснює малий вплив на домішку, і хвильова функція наближається до відповідного стану водневоподібної домішки у масивному кристалі HgS . Такі значення (значення водневоподібної домішки у масивному кристалі) набуває енергія (рис.2). Коли радіус квантової точки зменшується, хвильова функція зміщується у внутрішній простір квантової точки обмежуючим потенціалом. При цьому відбувається розщеплення енергетичних рівнів, які є виродженими у для домішки масивному кристалі (наприклад, енергії 2p-та 2s-станів). При подальшому зменшенні радіуса КТ, хвильова функція все більше починає проникати у матрицю. Відповідна енергія зростає. Далі відбувається перехід хвильової функції із внутрішньої до зовнішньої області ями. Коли ж розміри сферичної КТ малі, то хвильова функція знову стає схожою до хвильової функції водневоподібної домішки у масивному кристалі HgS . Тобто електрон виштовхується за межі квантової точки. Тоді енергія домішкового електрона стає такою самою, як у масивному кристалі CdS , але збільшена на величину потенціального бар'єру U_0 .

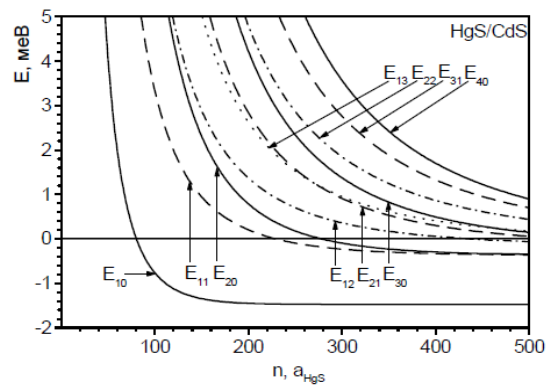


Рисунок 2. Залежність енергетичного спектру електрона від радіуса квантової точки HgS/CdS . Суцільні лінії – стани з $l = 0$, штрихові лінії – $l = 1$, штрих-пунктирні $l = 2$ та $l = 3$.

Якщо домішка знаходиться не у центрі КТ, то відповідні результати залежності енергії від розташування домішки визначено у роботах [9, 21]. Зокрема нехтуючи поляризаційними зарядами, у [9] визначено енергетичний спектр як функцію D/a при фіксованому радіусі КТ гетеросистеми $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$. Енергії подано в одиницях Ry^* , а радіуси КТ в одиницях a_b^* (рис.3,4).

Результати показали, що віддалення іона домішки від центра КТ веде до розщеплення енергетичних рівнів за модулем магнітного квантового числа $|m|$. Причиною цього є порушення центральної симетрії задачі, однак зберігається циліндрична симетрія. Видно, що віддалення домішки від центра КТ до її поверхні веде до збільшення енергії. Коли ж домішка знаходиться далеко від поверхні КТ, то енергія електрона прямує до значення, яку має електрон у КТ за відсутності домішок.

У роботі [21] розв'язано аналогічну задачу про нецентральної домішку для гетеросистеми CdS/SiO_2 з врахуванням поляризаційних зарядів (рис.5). Обчислення основного та першого збудженого стану проведено варіаційним методом Рітца та лінійним варіаційним методом. Результати обчислень енергії подано на рис.5. Також на ньому зображено графіки енергії цих же станів, що обчислено лінійним варіаційним методом для їх порівняння. З рисунка чітко видно, що варіаційний метод Рітца дає кращі результати для енергії основного стану і водночас гірші для першого збудженого порівняно з описаним лінійним варіаційним методом. Ці розбіжності

ті спостерігаються, коли іон домішки зміщується від центра і перебуває у КТ. Коли ж іон домішки знаходиться за межами КТ, то два методи дають практично однакові

результати. Відповідна різниця зменшується при зростанні D/a . Як видно, врахування поляризаційних зарядів веде до збільшення енергії.

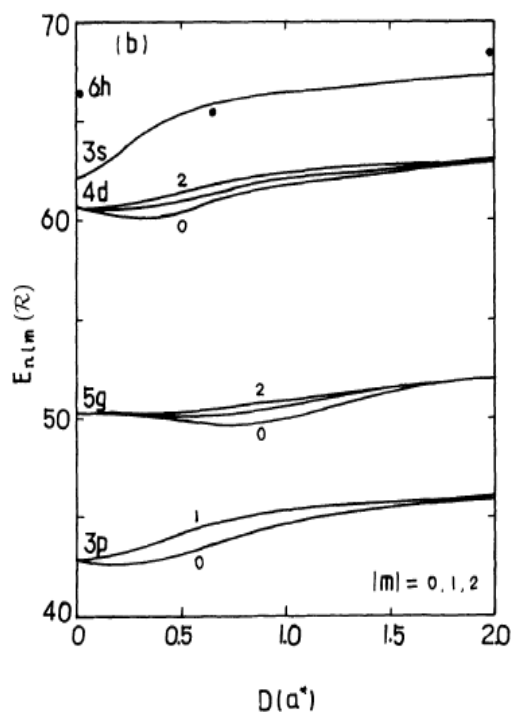
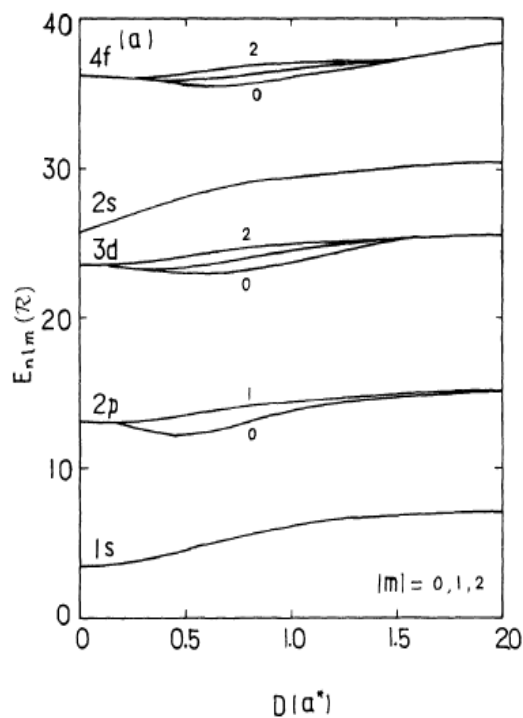


Рисунок 3. Енергетичні рівні E_{nlm} основного та збудженого стану з $|m|=0,1,2$ як функція розташування домішки, якщо радіус КТ $1a_b^*$.

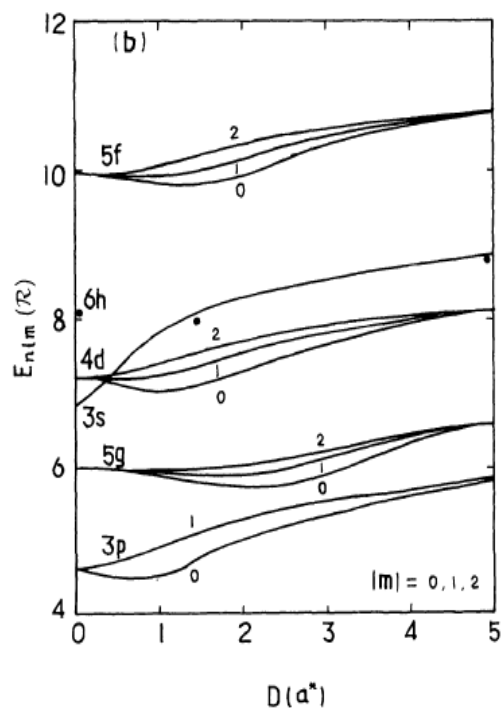
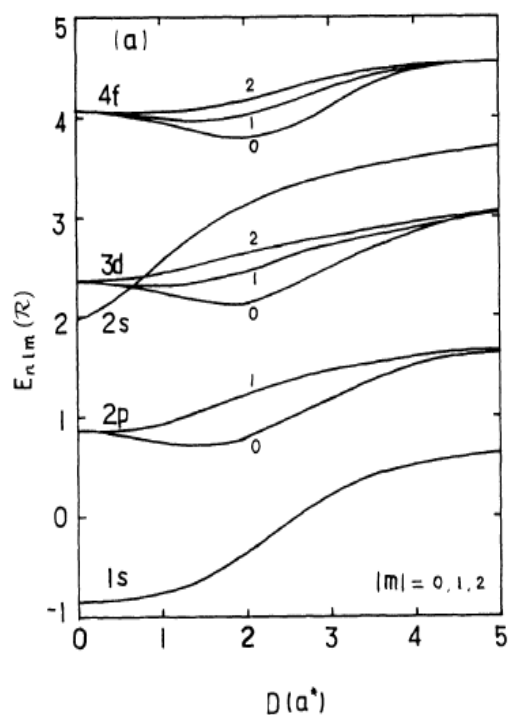


Рисунок 4. Енергетичні рівні E_{nlm} основного та збудженого стану з $|m|=0,1,2$ як функція розташування домішки, якщо радіус КТ $3a_b^*$.

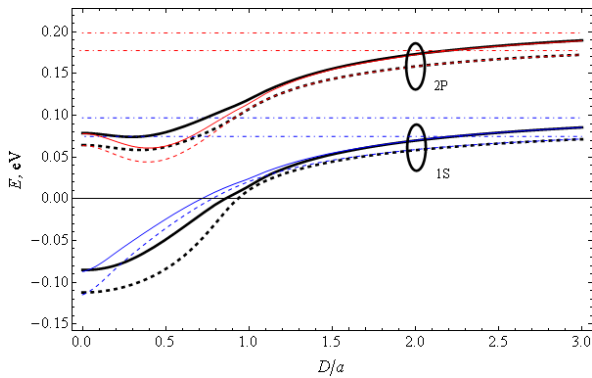


Рисунок 5. Енергія основного (1S) та першого збудженого (2P) станів нецентральної домішки у сферичній КТ, як функція розташування домішки. Штрихові лінії позначають енергію без врахування поляризаційних зарядів ($\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_{\text{average}}$), суцільні – з врахуванням. Чорні криві – енергії, що обчислені прямим варіаційним методом Рітца, сині та червоні – лінійним варіаційним методом. Горизонтальні штрих-пунктирні криві позначають енергію електрона у КТ без іона домішки (з врахуванням та без врахування поляризаційних зарядів). Радіус КТ $a = 40 \text{ \AA}$

Окрім однієї донорної домішки у КТ досліджують також і більше домішок. Зокрема у роботах [22-23] розглянуто два іони домішок і електрон у КТ. У [22] побудовано модель, у якій один іон знаходиться постійно у центрі, а інший – у будь-якому місці сферичної КТ. Для обчислень енергії основного стану використано варіаційний метод і теорію збурень. Результати подано на рис.6. З рисунка 6 видно, що зміщення однієї домішки від центру КТ веде до зростання відповідної енергії системи, яка прямує до енергії, яка відповідає КТ з однією домішкою у центрі. Відповідні висновки підтверджує графік розподілу густини ймовірності (рис.7).

На рис. 7 зображено розподіл густини ймовірності перебування електрона в КТ з двома донорними домішками при різних значеннях розташування домішки. Положення домішок позначено точками. З рис. 7 видно, що незалежно від положення розташування другої домішки найбільш імовірним положенням електрона залишається область у центрі КТ. Отже, взаємодія електрона в основному стані з центральною домішкою сильніша за взаємодію з нецентральною. Така ситуація, зумовлена досить сильним потенціалом обмеження КТ.

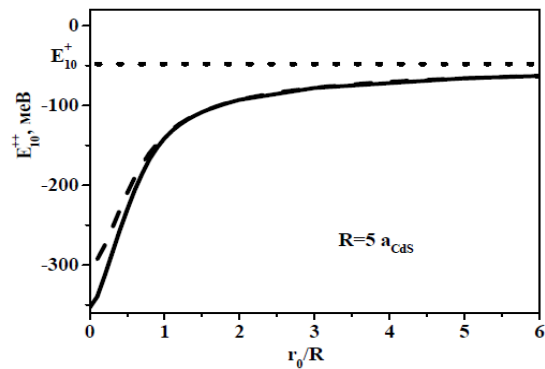


Рисунок 6. Залежність енергії основного стану електрона в КТ CdS/SiO_2 з центральною донорною домішкою від положення іншої донорної домішки: варіаційний метод – суцільна лінія; теорія збурень – штрихова лінія; без другої домішки – точкова лінія. Радіус КТ $R = 5 a_{\text{CdS}}$.

Дещо іншу залежність отримано у роботі [23] з двома діаметрально розташованими іонами домішок на відстані D кожна від центру квантової точки. Тут проведено обчислення методом розкладу по повній системі функцій, що відповідає за домішку у центрі КТ, метод лінійної комбінації варіаційних функцій (МЛКВФ) та метод скінченних елементів (рис.8).

Як видно зазначені методи дають досить близькі значення енергії, саме тому для обчислення інших збуджених станів було застосовано перший метод (рис.9). 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 $|m|$.

З графіка видно, що при значному віддаленні домішок від центру, Р-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.10). 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 [21]. У граничному випадку коли $D \rightarrow 0$, можна отримати результати, що відповідають

випадку заряду іона домішки $q=2e$, який поміщений у центрі КТ. На рис.10 також подано графіки розподілу густини ймовірності для основного стану при $a = 40 \text{ \AA}$ для різних D/a .

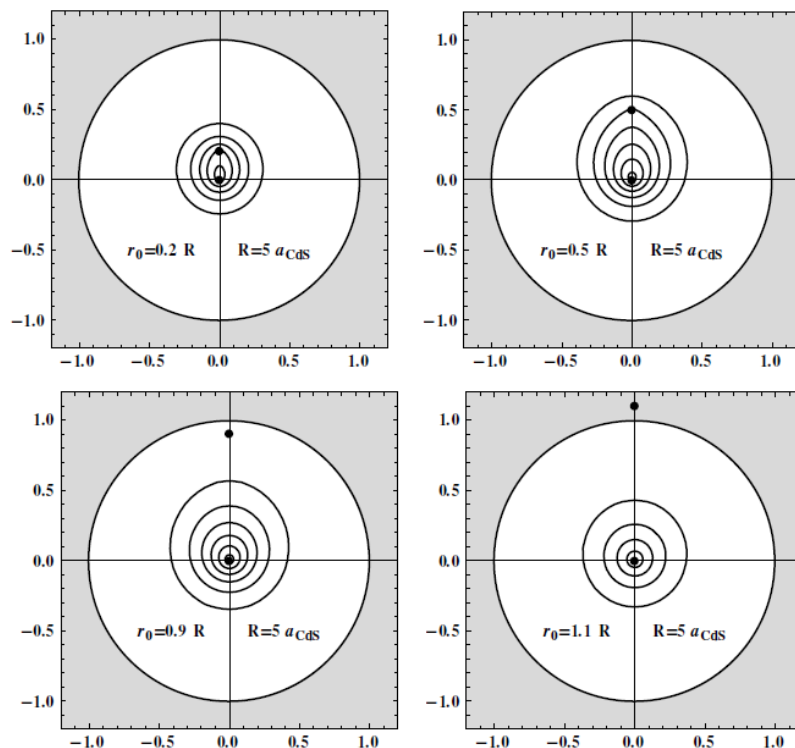


Рисунок 7. Розподіл густини ймовірності перебування електрона в КТ з двома донорними домішками при різних положеннях домішки.

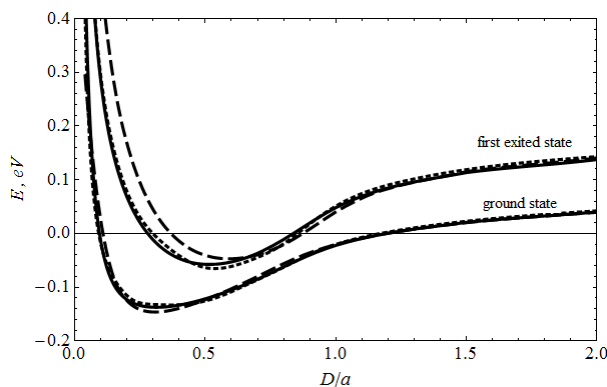


Рисунок 8. Енергія електрона у КТ з двома іонами домішок для різних D/a . Суцільні криві – метод розкладу по системі функцій, штрихова – МЛКВФ, пунктирна – метод скінченних елементів. Тут також враховано енергію відштовхування іонів.

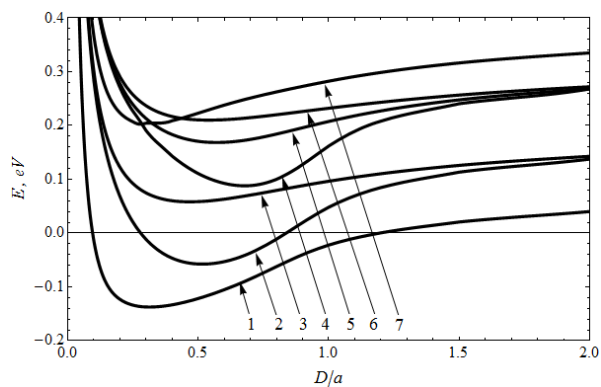


Рисунок 9. Енергетичний спектр електрона у КТ з двома діаметрально розташованими іонами домішок. Радіус КТ $a=40 \text{ \AA}$.

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 ($|m|=0$).

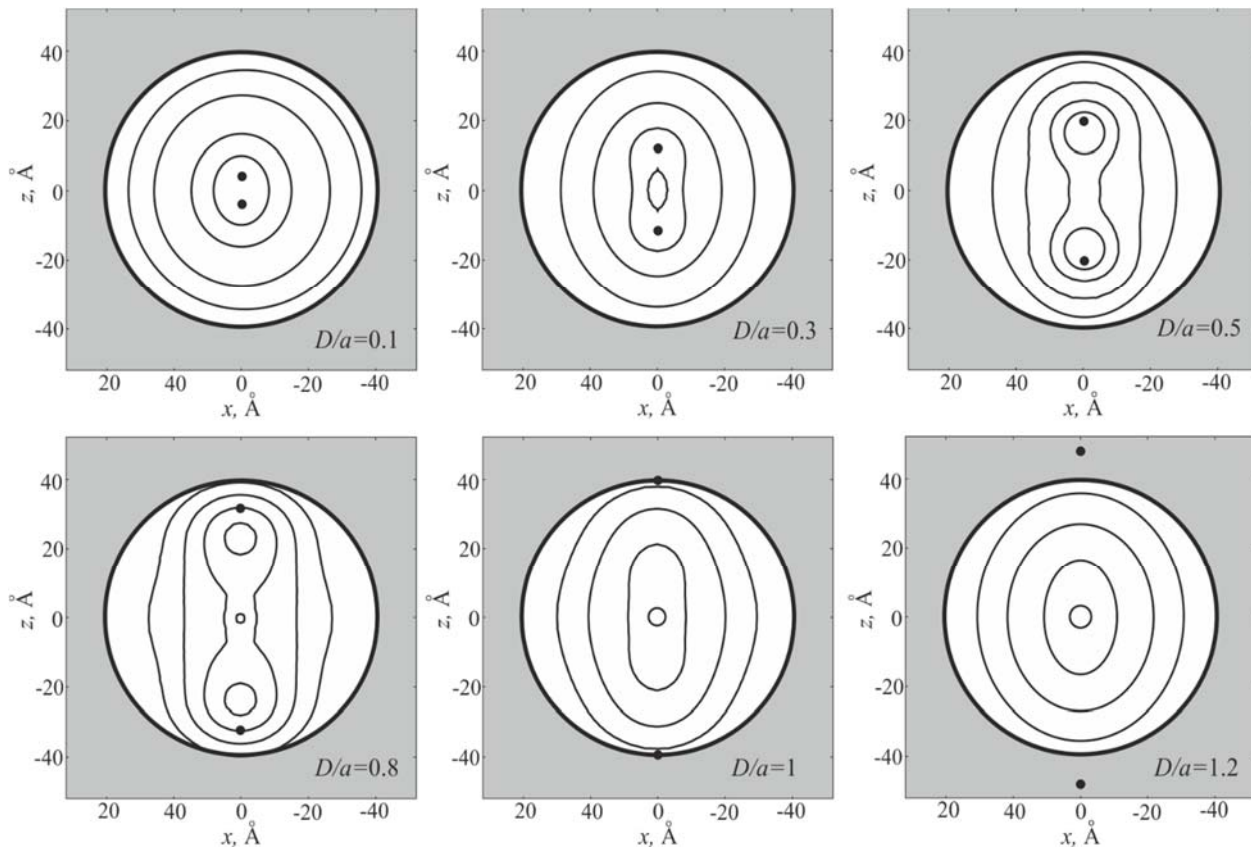


Рисунок 10. Розподіл густини ймовірності перебування електрона у КТ з двома іонами домішок. Точками позначено розташування іонів. Радіус КТ $a = 40 \text{ Å}$.

1.2. Акцепторні домішки

Найпростішим підходом для визначення енергетичного спектру акцепторних домішок у КТ може бути застосування такого ж підходу як і для донорних лише із заміною величини розриву зон та ефективної маси дірки. Однак таке застосування є не зовсім вірним, бо у більшості напівпровідників валентна зона має досить складну структуру та часто є виродженою у своїй вершині. Саме тому для обчислення діркових чи акцепторних станів у КТ доцільно застосовувати багатозонні моделі ефективної маси, зокрема і теорії Латтінджера.

Для кристалів типу цинкової обманки типова зонна структура має такий вигляд як на рис.11. [24].

Нехтуючи гофрованістю ізоенергетичних поверхонь у просторі хвильового вектора, гамільтоніан має вигляд:

$$\hat{H} = \hat{H}_{8 \times 8} + \Pi(\vec{r}),$$

де

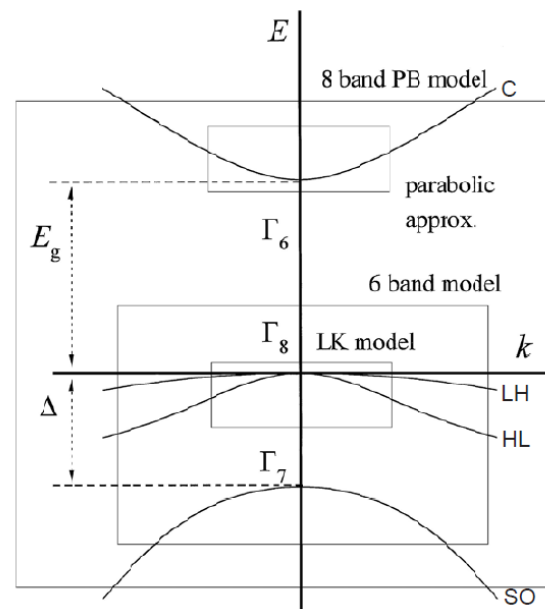


Рисунок 11. Зонна схема кристалів масивних напівпровідників типу цинкової обманки. Валентна зона є шестикратно виродженою в точці Γ , якщо не враховувати спин-орбітальну взаємодію. Врахування спин-орбітальної взаємодії розділяє зони на: зону легких дірок (light hole LH), зону важких дірок (heavy hole HH) та спин-орбітальну відщеплену зону (SO).

$$\hat{\mathbf{H}}_{8 \times 8} = \begin{pmatrix} E_g + \frac{\alpha}{2m_0} \hat{\mathbf{p}}^2 & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} V \hat{\mathbf{p}}_+ & \sqrt{\frac{2}{3}} V \hat{\mathbf{p}}_z & \frac{i}{\sqrt{6}} V \hat{\mathbf{p}}_- & 0 & \frac{i}{\sqrt{3}} V \hat{\mathbf{p}}_z & \frac{1}{\sqrt{3}} V \hat{\mathbf{p}}_- \\ 0 & E_g + \frac{\alpha}{2m_0} \hat{\mathbf{p}}^2 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}} V \hat{\mathbf{p}}_+ & i \sqrt{\frac{2}{3}} V \hat{\mathbf{p}}_z & -\frac{1}{\sqrt{2}} V \hat{\mathbf{p}}_- & \frac{i}{\sqrt{3}} V \hat{\mathbf{p}}_+ & -\frac{1}{\sqrt{3}} V \hat{\mathbf{p}}_z \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} V \hat{\mathbf{p}}_- & 0 & -(\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{Q}}) & -\hat{\mathbf{L}} & -\hat{\mathbf{M}} & 0 & -i \sqrt{\frac{1}{2}} \hat{\mathbf{L}} & i \sqrt{2} \hat{\mathbf{M}} \\ \sqrt{\frac{2}{3}} V \hat{\mathbf{p}}_z & -\frac{1}{\sqrt{6}} V \hat{\mathbf{p}}_- & -\hat{\mathbf{L}}^* & -(\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{Q}}) & 0 & -\hat{\mathbf{M}} & i \sqrt{2} \hat{\mathbf{Q}} & -i \sqrt{\frac{3}{2}} \hat{\mathbf{L}} \\ -\frac{i}{\sqrt{6}} V \hat{\mathbf{p}}_+ & -i \sqrt{\frac{2}{3}} V \hat{\mathbf{p}}_z & -\hat{\mathbf{M}}^* & 0 & -(\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{Q}}) & \hat{\mathbf{L}} & i \sqrt{\frac{3}{2}} \hat{\mathbf{L}}^* & i \sqrt{2} \hat{\mathbf{Q}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} V \hat{\mathbf{p}}_+ & 0 & -\hat{\mathbf{M}}^* & \hat{\mathbf{L}}^* & -(\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{Q}}) & i \sqrt{2} \hat{\mathbf{M}}^* & i \sqrt{\frac{1}{2}} \hat{\mathbf{L}}^* \\ -\frac{i}{\sqrt{3}} V \hat{\mathbf{p}}_z & -\frac{i}{\sqrt{3}} V \hat{\mathbf{p}}_- & i \sqrt{\frac{1}{2}} \hat{\mathbf{L}}^* & -i \sqrt{2} \hat{\mathbf{Q}} & -i \sqrt{\frac{3}{2}} \hat{\mathbf{L}} & -i \sqrt{2} \hat{\mathbf{M}} & -\Delta_{SO} - \hat{\mathbf{p}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} V \hat{\mathbf{p}}_+ & -\frac{1}{\sqrt{3}} V \hat{\mathbf{p}}_z & -i \sqrt{2} \hat{\mathbf{M}} & -i \sqrt{\frac{3}{2}} \hat{\mathbf{L}}^* & -i \sqrt{2} \hat{\mathbf{Q}} & -i \sqrt{\frac{1}{2}} \hat{\mathbf{L}} & 0 & -\Delta_{SO} - \hat{\mathbf{p}} \end{pmatrix} \quad (8)$$

$$\hat{\mathbf{p}}_{\pm} = \hat{\mathbf{p}}_x \pm i \hat{\mathbf{p}}_y, \quad \hat{\mathbf{p}}_{\perp}^2 = \hat{\mathbf{p}}_x^2 + \hat{\mathbf{p}}_y^2,$$

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{\gamma_1}{2m_0} \hat{\mathbf{p}}^2, \quad \hat{\mathbf{Q}} = \frac{\gamma}{2m_0} (\hat{\mathbf{p}}_{\perp}^2 - \hat{\mathbf{p}}_z^2),$$

$$\hat{\mathbf{L}} = \frac{-i\sqrt{3}\gamma}{m_0} \hat{\mathbf{p}}_z \hat{\mathbf{p}}_-, \quad \hat{\mathbf{M}} = \frac{\sqrt{3}\gamma}{2m_0} \hat{\mathbf{p}}_-^2,$$

E_g - величина забороненої зони, Δ_{so} - енергія спин-орбітальної взаємодії, $V = -i \langle S | \hat{\mathbf{p}}_z | Z \rangle / m_0$. Тут S – функція Блоха зони провідності в точці Γ , X , Y , Z – три вироджені функції Блоха валентної зони у точці Γ . γ_1 , γ – параметри Латгінджера.

Якщо величина забороненої зони досить велика, то можна знехтувати зоною провідності і розглядати діркові стани окремо. Тоді гамільтоніан набуде вигляду:

$$\hat{\mathbf{H}}_{6 \times 6} = \begin{pmatrix} -(\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{Q}}) & -\hat{\mathbf{L}} & -\hat{\mathbf{M}} & 0 & -i \sqrt{\frac{1}{2}} \hat{\mathbf{L}} & i \sqrt{2} \hat{\mathbf{M}} \\ -\hat{\mathbf{L}}^* & -(\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{Q}}) & 0 & -\hat{\mathbf{M}} & i \sqrt{2} \hat{\mathbf{Q}} & -i \sqrt{\frac{3}{2}} \hat{\mathbf{L}} \\ -\hat{\mathbf{M}}^* & 0 & -(\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{Q}}) & \hat{\mathbf{L}} & i \sqrt{\frac{3}{2}} \hat{\mathbf{L}}^* & i \sqrt{2} \hat{\mathbf{Q}} \\ 0 & -\hat{\mathbf{M}}^* & \hat{\mathbf{L}}^* & -(\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{Q}}) & i \sqrt{2} \hat{\mathbf{M}}^* & i \sqrt{\frac{1}{2}} \hat{\mathbf{L}}^* \\ i \sqrt{\frac{1}{2}} \hat{\mathbf{L}}^* & -i \sqrt{2} \hat{\mathbf{Q}} & -i \sqrt{\frac{3}{2}} \hat{\mathbf{L}} & -i \sqrt{2} \hat{\mathbf{M}} & -\Delta_{SO} - \hat{\mathbf{p}} & 0 \\ -i \sqrt{2} \hat{\mathbf{M}} & -i \sqrt{\frac{3}{2}} \hat{\mathbf{L}}^* & -i \sqrt{2} \hat{\mathbf{Q}} & -i \sqrt{\frac{1}{2}} \hat{\mathbf{L}} & 0 & -\Delta_{SO} - \hat{\mathbf{p}} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

З таким гамільтоніаном було розв'язано задачу про центральну акцепторну домішку у сферичній наногетеросистемі [25], однак потенціал обмеження був вибраний нескінченно високим. Знайдено розв'язки за

допомогою розвинутого раніше цими ж авторами чисельно-аналітичного методу [26]. Результати подано графічно (рис.12). Також у цій роботі досліджено вплив величини спин-

орбітальної взаємодії на енергетичний спектр дірки та акцептора.

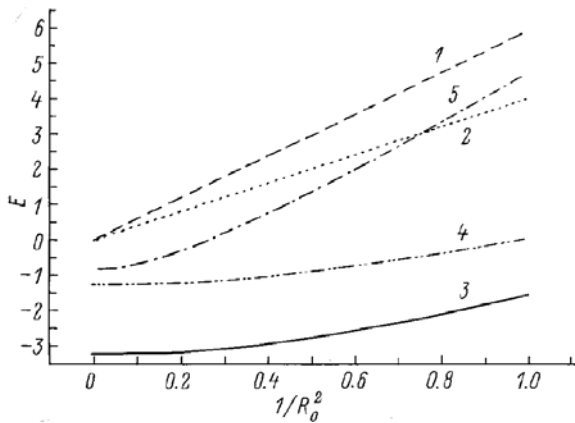


Рисунок 12. Залежність енергії нижчих станів дірки та акцептора у КТ від оберненого квадрата радіуса КТ R_0 ; $\mu=0.8$. Енергія подана в одиницях Ry^* . 1 – S_{1-} ; 2 – P_{1-} -стани дірки у КТ без іона домішки; 3 – $1S_{1-}$; 4 – $2P_{1-}$; 5 – $2P_{2-}$ -стани акцепторної домішки.

Оскільки використано модель з нескінченним розривом зон, то розрахунок проведено без прив'язки до конкретного кристалу. Єдиним параметром, що визначає кристал є параметр $\mu = (4\gamma_2 + 6\gamma_3) / 5\gamma_1$. Також у [26] показано, що збільшення величини спін-орбітальної взаємодії Δ_{SO} порядку більше $5Ry^*$ для радіусів більших $3R_0$ і великих значень $\mu \geq 0.8$ значення енергії перестає залежати від Δ_{SO} . Для менших радіусів КТ порядку $1R_0$ і великих значень μ енергія виходить на насичення при значно більших Δ_{SO} . Для малих же значень $\mu \leq 0.5$ енергія домішки є слабо чутливою до значень Δ_{SO} . Це все означає, що є кристали, в яких можна знехтувати спін-відщепленою зоною і розглянути лише зони важких і легких дірок. Саме для таких кристалів можна записати гамільтоніан 4×4 :

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma \right) \hat{p}^2 - \gamma \left(\hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{J}} \right)^2 + \Pi(\vec{r}), \quad (10)$$

де $\hat{\vec{J}} = \hat{i}\hat{J}_x + \hat{j}\hat{J}_y + \hat{k}\hat{J}_z$ – оператор спінового моменту $3/2$.

Гамільтоніан (10) був застосований до гетеросистеми $GaSb/AlSb$ з КТ, у центрі якої розташований іон акцепторної домішки [16]. У цій роботі для визначення енергії акцептора використано метод розкладу по системі функцій без домішки. Також було

отримано спеціальні граничні умови, які застосовано до цієї задачі.

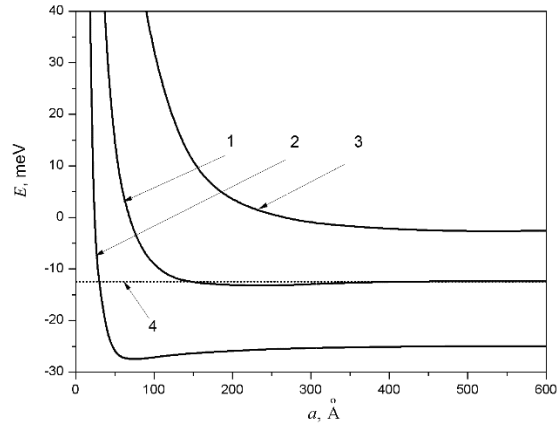


Рисунок 13. Енергія основного стану дірки акцепторної домішки для чотиризонної з точними граничними умовами (крива 1) і для однозонної (криві 2, 3) моделей. Крива 4 позначає енергію мілкої акцепторної домішки у масивному кристалі $GaSb$.

На рис.13 графічно зображено залежність енергії основного стану акцептора, що обчислена враховуючи чотиризонний гамільтоніан і точні граничні умови (крива 1), зону важких (крива 2) та зону легких (крива 3) дірок. Горизонтальною пунктирною лінією позначено енергію акцепторної домішки у масивному кристалі $GaSb$. Як і для дірки без акцепторної домішки, врахування лише зони важких дірок занижує енергію акцепторного стану, а врахування лише зони легких дірок – її завищує. Енергія основного стану акцепторної домішки, що обчислена у межах чотиризонної моделі для великих радіусів КТ, прямує до відповідної енергії у масивному кристалі [13] (горизонтальна пунктирна пряма). Врахування точної потенціальної енергії взаємодії дірки з іоном домішки та взаємодії дірки з поляризаційними зарядами у всіх трьох моделях при зменшенні розмірів сферичної квантової точки веде до немонотонної залежності енергії від радіуса КТ. Зменшення розмірів КТ спочатку веде до незначного зменшення енергії, внаслідок зростання ефективної потенціальної ями, а подальше зменшення радіуса супроводжується ростом енергії, бо далі вплив просторового обмеження дірки переважає збільшення ефективної потенціальної ями. Зважаючи на те, що діелектричні проникності не дуже відрізняються, згадана немонотонність слабо помітна на графіку.

У цій же моделі розглянуто нецентрально акцепторну домішку у КТ *CdSe* [27]. Обчислення енергії нецентральної домішки проведено і варіаційним методом Рітца (лише основний стан), і методом розкладу по повній системі функцій. Для детального аналізу та відображення всієї динаміки зміни енергій дослідження проведено для радіуса КТ $a = 25 \text{ \AA}$. Результати обчислень подано на рис.14. Тут суцільними кривими позначено енергію акцепторної домішки, що обчислена методом розкладу по системі функцій задачі без домішки, а штриховими – методом Рітца. Як було зазначено вище, варіаційний функціонал залежить від квантового числа M : $F(M)$. Зважаючи на це, енергія нецентральної домішки також формально залежить від M . Однак обчислення показали, що енергія нецентральної домішки залежить лише від $|M|$. Таким чином, основний стан домішки при її зміщенні від центру КТ розщеплюється на 2 стани з $|M|=3/2$ (крива 1') і два з $|M|=1/2$ (крива 2'). Причину такої залежності від $|M|$ можна пояснити порушенням сферичної симетрії задачі та збереженням циліндричної симетрії. Схожі розщеплення енергетичних рівнів було отримано для донорної домішки [21]. Однак у зв'язку з тим, що основний стан донорної домішки не вироджений в однозонній моделі, то відповідно розщеплення основного стану не відбувалося на відміну від акцепторної домішки.

Крім методу Рітца використано метод розкладу по повній системі функцій. Як видно з рис.14, при малих D/a цей метод дає енергію, що відрізняється від методу Рітца максимум на 10%. Для великих D/a – навпаки. Оскільки для малих D/a симетрія задачі наближається до сферично-симетричної, то у зв'язку з цим для малих D/a кількість доданків у розкладі треба збільшувати в чотири рази, що кардинально збільшить час обчислень. Саме тому для малих зміщень домішки краще користуватися запропонованим методом Рітца, а для великих — методом розкладу. Отже, на рис.14 кривою 1 позначено енергію $E_{1,3/2}$ вироджених станів домішки $\Psi_{1,-3/2}, \Psi_{1,3/2}$; 2 – $E_{1,1/2}$ вироджених станів $\Psi_{1,-1/2}, \Psi_{1,1/2}$; 3 – $E_{2,3/2}$ вироджених станів $\Psi_{2,-3/2}, \Psi_{2,3/2}$; 4 –

$E_{2,1/2}$ вироджених станів $\Psi_{2,-1/2}, \Psi_{2,1/2}$.

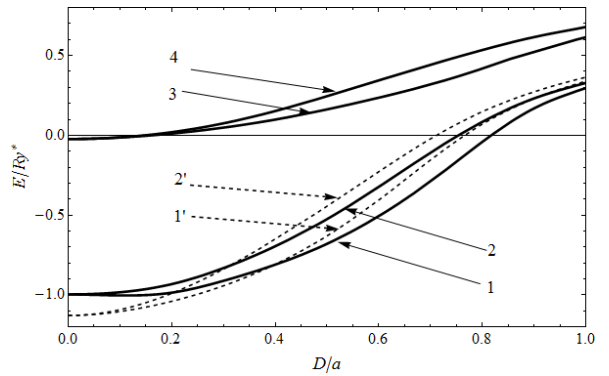


Рисунок 14. Енергія нецентральної акцепторної домішки у сферичній КТ *CdSe* як функція розташування іона домішки. Радіус КТ $a = 25 \text{ \AA}$.

Якщо ж величина спин-орбітальної взаємодії є малою (таке значення мають кристали кремнію), то нею можна знехтувати ($\Delta_{so}=0$). В такому випадку гамільтоніан у сферичному наближенні набуде вигляду:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\gamma_1 + 4\gamma) \hat{p}^2 - 3\gamma (\hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{J}})^2 + \Pi(\vec{r}), \quad (11)$$

де

$$\gamma = 1/5(3\gamma_3 + 2\gamma_2), \quad \hat{\vec{J}} = \hat{i}\hat{J}_x + \hat{j}\hat{J}_y + \hat{k}\hat{J}_z$$

– оператор спінового моменту $j = 1$. У рамках такої моделі було розв'язано відповідні рівняння та знайдено енергію дірки, акцептора та екситона у КТ. Використано модель скінченного розриву зон і граничні умови [17, 28-29]. Зокрема у [17] для акцепторної домішки (рис. 15) враховано вплив поляризаційних зарядів, внаслідок чого отримано характерні немотонності залежності енергії від радіуса, як і для донорних домішок.

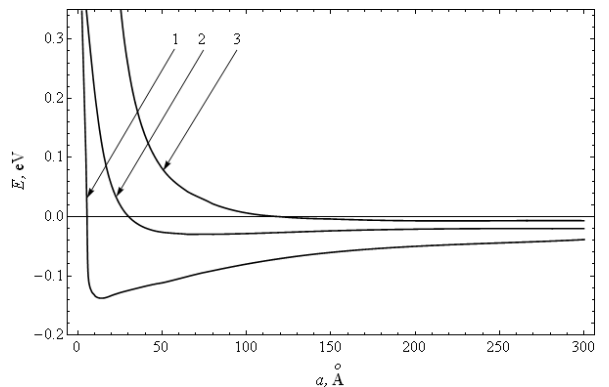


Рисунок 15. Залежність енергії акцепторної домішки від радіуса КТ. 1 – $1S_1$, 2 – $1P_1$, 3 – $1P_0$ (гетеросистема *Si/SiO2*).

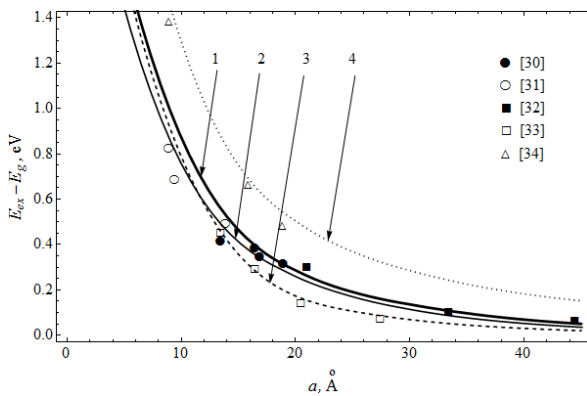


Рисунок 16. Енергія основного зв'язаного стану екситона, що обчислена з врахуванням (суцільні криві 1, 2) та без врахування (штрихова крива 3) складного зонного спектра. Енергія основного стану електрон-діркової пари без врахування їх взаємодії (пунктирна крива 4). (гетеросистема Si/SiO_2).

Також у цій же моделі визначено енергію екситона у КТ [17, 28-29]. З графіка (рис.16) видно, що одержано як якісну, так і добру кількісну збіжність результатів обчислень з експериментальними даними. Врахування складного зонного спектра для дірки, взаємодії частинок між собою та з поляризаційними зарядами дозволило встановити залежність енергії екситона, яку на графіку позначено суцільною кривою 1. Оскільки взаємодія заряджених квазічастинок з „власними“ поляризаційними зарядами на гетеромежах, які збільшують енергію екситона, є сильнішою ніж з „чужими“, які її зменшують, тому сумарний вплив поляризаційних зарядів є додатнім. Якщо припустити, що діелектрична проникність матриці дорівнює діелектричній проникності КТ, то відповідна енергія описуватиметься кривою 2. Ця крива розташована нижче за криву 1, бо при такому наближенні зникають всі поляризаційні поправки, що закладено у розглядувану модель.

Також встановлено, що зростання радіуса КТ веде до зменшення впливу властивостей матриці, зокрема і діелектричних властивостей, на енергію екситона, тому криві 1 і 2 для радіусів $a > 40 \text{ Å}$ починають наближатися одна до одної. Нехтуючи взаємодією електрона і дірки, можна одержати залежність енергії від радіуса КТ, яку позначено пунктирною кривою 4. Ця енергія є більшою від двох попередніх. Це зумовлено відсутністю врахування притягання між електроном і діркою, яке знижує енергію системи.

Якщо знехтувати складним зонним спектром у валентній зоні і для обчислень брати ефективну масу важкої дірки, то енергія основного стану екситона описуватиметься штриховою кривою 3. Як видно з рис.16 енергія основного стану екситона, що обчислена з врахуванням складного зонного спектра є більшою, ніж енергія екситона, що обчислена за моделлю простої параболічної зони важких дірок (крива 1 проходить вище кривої 3). Отже, однозонне наближення важкої дірки зміщує дірковий енергетичний рівень ближче до вершини валентної зони, а це веде до зменшення енергії екситона.

ВИСНОВКИ

Отже, цій статті описано методику обчислення енергетичного спектру КТ за наявності донорних чи акцепторних домішок у центрі КТ і поза ним. Проаналізовано отримані результати. Зокрема встановлено, що наявність акцепторної домішки не у центрі КТ спричинює розщеплення основного стану. А це у свою чергу спричинить не тільки кількісні, але і якісні відмінності у міжрівневому та міжзонному поглинанні світла такою КТ з домішкою

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- [1] Шкловский Б.И. Электронные свойства легированных полупроводников / Б.И. Шкловский, А.Л. Эрос. – Москва: Наука, 1979, – 416 с.
- [2] Bastard G. Hydrogenic impurity states in quantum well: A simple mode / G. Bastard // Phys. Rev. B. – 1981. – Vol. 24, № 8. – P. 4714-4722.
- [3] Bryant G.W. Hydrogenic impurity states in quantum-well wires / G.W. Bryant // Phys. Rev. B. – 1984. – Vol. 29, № 12. – P. 6632-6639.
- [4] Григорян Г.Б. Квантование дырки и край поглощения в сферических микрокристаллах полупроводников со сложной структурой валентной зоны / Г.Б. Григорян, [5] Э.М. Казарян, А.Л. Эфрос [и др.] // ФТТ. – 1990. – Т. 32, № 6. – С. 1772-1779.
- [6] Chu D.S. Hydrogenic impurity states in quantum dots and wires / D.S. Chu, C.M. Hsiao, and W.N. Mei // Phys. Rev. B. – 1992. – Vol. 46, № 7. – P. 3898-3905.

- [7] Zhu J.-L. Exact solution of hydrogenic donor states in a spherically rectangular quantum well / J.-L. Zhu // *Phys. Rev. B.* – 1989. – Vol. 39, № 12. – P. 8780-8783.
- [8] Zhu J.-L. Confined electron and hydrogenic donor states in a spherical quantum dot of GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs / J.-L. Zhu, J.-J. Xiong, B.-L. Gu // *Phys. Rev. B.* – 1990. – Vol. 41, № 9. – P. 6001-6007.
- [9] Riberio F.J. Impurities in a quantum dot: A comparative study / F.J. Riberio, A. Latge // *Phys. Rev. B.* – 1994. – Vol. 50, № 7. – P. 4913-4916.
- [10] Zhu J.-L. Spectrum and binding energy of an off-center donor in a spherical quantum dot / J.-L. Zhu, X. Chen // *Phys. Rev. B.* – 1994 Vol. 50, № 7. – P. 4497-4502.
- [11] Yang C.-C. Eigenstates and fine structure of a hydrogenic impurity in a spherical quantum dot / C.-C. Yang, L.-C. Liu, and S.-H. Chang // *Phys. Rev. B.* – 1998. – Vol. 58, № 4. – P. 1954-1961.
- [12] Ткач М.В. Спектр і хвильові функції водневоподібної домішки, розміщеної в центрі квантової точки / М.В. Ткач, В.А. Головацький, Я.М. Березовский // *Фіз. і хім. тверд. тіла.* – 2003. – Т. 4, № 2. – С. 213-220.
- [13] Lipari Nunzio O. Angular Momentum Theory and Localized States in Solids. Investigation of Shallow Acceptor States in Semiconductors / Nunzio O. Lipari, A Baldereschi // *Phys. Rev. Lett.* – 1970. – Vol. 25, № 24. – P. 1660-1664.
- [14] Baldereshi A. Spherical model of shallow acceptor states in semiconductors / A. Baldereshi, Nunzio O. Lipari // *Phys. Rev. B.* – 1973. – Vol. 8, № 6. – P. 2697-2709.
- [15] Гельмонт Б.Л. Акцепторные уровни в полупроводниках со структурой алмаза / Б.Л. Гельмонт, М.И. Дьяконов // *ФТП.* – 1971. – Т. 5, № 11. – С. 2191-2193.
- [16] Boichuk V.I. Ground and excited states of D^0 and D^- donors in a spherical quantum dot / V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, R.Ya. Leshko // *Ukr. J. Phys.* – 2008. – Vol. 53, № 10. – P. 991-996.
- [17] Boichuk V.I. Study of an acceptor impurity located at the center of a spherical nanoheterostructure / V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, R.Ya. Leshko, I.O. Shackleina // *Ukr. J. Phys.* – 2010. – Vol. 55, № 3. – P. 326-334.
- [18] Boichuk V.I. Hole, impurity and exciton states in a spherical quantum dot / V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, R.Ya. Leshko // *Condensed Matter Physics.* – 2010. – Vol. 13, № 1. – P. 13702(1)-13702(12).
- [19] Бойчук В.І. Вплив сил зображень на енергетичний спектр електрона у складному сферичному мікрокристалі / В.І. Бойчук, Р.Ю. Кубай, І.В. Білинський // *ЖФД.* – 1999. – Т. 3, № 2. – С. 187-191..
- [20] Бойчук В.І. Влияния промежуточного слоя с переменной от координаты диэлектрической проницаемостью на энергию основного состояния электрона в сферической сложной наногетеросистеме / В.И. Бойчук, Р.Ю. Кубай // *ФТТ.* – 2001. – Т. 43, № 2. – С. 226-232.
- [21] Бойчук В.І. Дослідження впливу поляризації на енергію електрона, дірки сферичної наногетеросистеми напівпровідників (на прикладі структур Si/SiO_2 , β - HgS/CdS) / В.І. Бойчук, Р.Ю. Кубай, Г.М. Годованець [та ін.] // *ЖФД.* – 2006. – Т. 10, № 3. – С. 220-226.
- [22] Boichuk V.I. The effect of the polarization charges on the optical properties of a spherical quantum dot with an off-central hydrogenic impurity / V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, R.Ya. Leshko, L.M. Turyanska // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures.* – 2011. – Vol. 45, № 2. – P. 476-482.
- [23] Головацький В.А. Енергії та хвильові функції електрона у сферичній квантовій точці CdS/SiO_2 з однією та двома водневоподібними домішками / В.А. Головацький, І.Б. Франків // *Журнал фізичних досліджень.* – 2012. – Т. 16, № 1/2. – С. 1706(1)-1706(9).
- [24] Boichuk V.I. Optical properties of a spherical quantum dot with two ions of hydrogenic impurity / V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, R.Ya. Leshko [and other] // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures.* – 2013. – Vol. 54. – P. 281-287.
- [25] Pidgeon, C. R. and Brown, R. N., "Interband magneto-absorption and faraday rotation in

insb,” *PHYSICAL REVIEW*, vol. 146, no. 2, pp. 575–&, 1966.

[26] Полупанов А.Ф. Влияние спин-орбитального взаимодействия на оптические спектры акцептора в полупроводниковой квантовой точке / А.Ф. Полупанов, В.И.Галиев, М.Г.Новак // ФТП, 1997, том 31, выпуск 11. С. 1375–1382.

[27] V.I. Galiev, A.F. Polupanov, I.E. Shparlinski. *J. Comput. Appl. Math.*, **39**, 151 (1992)

[28] Boichuk V.I. Off-central acceptor impurity in a spherical quantum dot/ V.I. Boichuk, R.Ya. Leshko, I.V. Bilynskyi, L.M. Turyanska // *Condensed Matter Physics*. – 2012. – Vol. 15, № 3. – P. 33702: 1–10.

[29] Moskalenko A.S. Single-particle states in spherical *Si/SiO₂* quantum dots / A.S Moskalenko, J. Berakdar, A.A. Prokofiev [and al.] // *Phys. Rev. B*. – 2007. – Vol. 76, № 8. – P. 085427-085436.

[30] Kanzawaa Y. Size-dependent near-infrared photoluminescence spectra of Si nanocrystals embedded in *SiO₂* matrices / Y. Kanzawaa,

T. Kageyamaa, S. Takeokaa [and al.] // *Solid State Commun.* – 1997. – Vol. 102, № 7. – P. 533-537.

[31] Guha S. Characterization of *Si* nanocrystals grown by annealing *SiO₂* films with uniform concentrations of implanted *Si* / S. Guha, B. Qadri, R.G. Musket [and al.] // *J. Appl. Phys.* – 2000. – Vol. 88, № 7. – P. 3954-3957.

[32] Takeoka S. Size-dependent photoluminescence from surface-oxidized *Si* nanocrystals in a weak confinement regime / S. Takeoka, M. Fujii, S. Hayashi // *Phys. Rev. B*. – 2000. – Vol. 62, № 24. – P. 16820-16825.

[33] Watanabe K. Resonant excitation of *Er³⁺* by the energy transfer from *Si* nanocrystals / K. Watanabe, M. Fujii, S. Hayashi // *J. Appl. Phys.* – 2001. – Vol. 90, № 9. – P. 4761-4766.

[34] Wolkin M.V. Electronic states and luminescence in porous silicon quantum dots: the role of oxygen / M.V. Wolkin, J. Jorne, P.M. Fauchet [and al.] // *Phys. Rev. Lett.* – 1999. – Vol. 82, № 1. – P. 197-200.