

Устинов В. М., Копьев П. С., Пунин В. Т., Ильяев Р. И., Алфёров Ж. И. // ФТП.– 2006. – Т. 40, № 6. – С. 707 – 710.

3. Вилисова М. Д. Легирование слоев GaAs кремнием в условиях низкотемпературной молекулярно-лучевой эпитаксии / Вилисова М. Д., Куницын А. Е., Лаврентьева Л. Г., Преображенский В. В., Пулято М. А., Семягин Б. Р., Торопов С. Е., Чалдышев В. В. // ФТП.– 2002. – Т. 14, № 11. – С. 3157 – 3161.

4. Пелешак Р. М. Вплив деформаційних ефектів на електричні властивості структури метал – напівпровідник – легований напівпровідник / Пелешак Р. М., Кузик О. В., Даньків О. О. // УФЖ.– 2010. – Т. 55, № 4. – С. 437 – 442.

5. Пелешак Р. М. Самоорганізований дифузійно-деформаційний розподіл точкових дефектів у напружених гетеросистемах / Пелешак Р. М., Кузик О. В. // УФЖ. – 2007. – Т. 52. – № 7. – С. 689 – 694.

6. Власов Н. М. Влияние атомов примеси на процесс размножения краевых дислокаций / Власов Н. М., Зазноба В. А. // ЖТФ.– 2001. – Т. 71, № 1. – С. 53 – 56.

7. Emel'yanov V. I. The Entropy barrier and the rate of diffusion-strain nucleation of clusters of point defects in laser-irradiated solids / Emel'yanov V. I., Shlykov Yu. G. // LaserPhysics. – 1996. – Vol. 6, № 4. – P. 713 – 720.

8. White B. D. Electrical, spectral, and chemical properties of 1.8 MeV proton irradiated AlGaIn/GaN HEMT structures as a function of proton fluence / White B. D., Bataiev M., Goss S. H., Hu X., Karmarkar A., Fleetwood D. M., Schrimpf R. D., Schaff W. J., Brillson L. J. // IEEE Transactions on Nuclear Science. – 2003. – Vol. 50, № 6. – P. 1934 – 1941.

9. Дымников В. Д. Уровни энергий в квантовой яме с прямоугольными стенками сложной формы / Дымников В. Д., Константинов О. В. // ФТП.– 1995. – Т. 29, № 1. – С. 133 – 139.

УДК 5

**Роман ЛЕШКО,  
Леся ТУРЯНСЬКА**

### **ДИСКРЕТНИЙ СПЕКТР ВОДНЕВОПОДІБНОЇ ДОМІШКИ У ДВОШАРОВІЙ СФЕРИЧНІЙ КВАНТОВІЙ ТОЧЦІ ВІДКРИТОГО ТИПУ**

*У роботі на основі точного розв'язку рівняння Пуассона для двошарової квантової точки з позитивно зарядженим іоном донора у її центрі визначено потенціальну енергію взаємодії іона домішки з електроном з урахуванням різних відомих значень діелектричних проникностей  $Si$  та  $SiO_2$ . Використовуючи знайдену потенціальну енергію, точно розв'язано рівняння Шредінгера для водневоподібної домішки у цій системі, досліджено вплив зовнішнього й внутрішнього радіусів на спектр електрона.*

**Ключові слова:** водневоподібна домішка, потенціальна енергія, двошарова квантова точка.

*In the work on the basis of the exact solution of the Poisson equation for a two-layer quantum dot with positively charged ion of the donor in its centre the potential energy of the interaction of an impurity ion with the electron taking into account different known values of dielectric permittivity of Si and SiO<sub>2</sub> is defined. Using the found potential energy, the Schrödinger equation for the hydrogenic impurity in this system is solved exactly. The influence of external and internal radiuses on the electron spectrum is investigated.*

**Keywords:** hydrogenic impurity, potential energy, two-layer quantum dot.

### 1. Вступ

Останнім часом проведено багато досліджень домішкових станів у різних обмежених системах, зокрема у квантових точках (КТ). Значна частина теоретичних робіт присвячена вивченню одношарових сферичних КТ у межах континуальної моделі, на основі якої отримують добре узгоджені з експериментальними даними. У роботах [1 – 5] проведено перші теоретичні дослідження домішкових станів у КТ, отримано точні розв'язки рівняння Шредінгера з кулонівською потенціальною взаємодією між частинками. Грунтуючись на точних розв'язках, визначено також енергетичні стани донора, розташованого не в центрі сферичної КТ. Результати показали розщеплення та зміну порядку рівнів залежно від радіуса КТ, розташування донора і висоти ями. Причиною розщеплення та зміни порядку рівнів є порушення симетрії системи та конкурування кулонівської взаємодії і просторового обмеження.

Сучасні експериментальні технології та методи дають змогу створювати багатшарові сферично-симетричні наногетеросистеми. Наприклад, у роботах [6 – 7] описано метод іонного заміщення під тиском, за допомогою якого створено сферичні наногетеросистеми  $\beta\text{-CdS}/\beta\text{-HgS}/\text{H}_2\text{O}$  та  $\beta\text{-CdS}/\beta\text{-HgS}/\beta\text{-CdS}/\text{H}_2\text{O}$ . У роботі [8] для сферичної наногетеросистеми  $\beta\text{-HgS}/\beta\text{-CdS}/\beta\text{-HgS}$  теоретично знайдено та проаналізовано положення енергетичних рівнів залежно від розмірів шарів гетеросистеми.

Перші спроби вивчення домішки у багатшаровій КТ проведено у роботі [9], де варіаційним методом визначено основний стан донора. А у роботі [10] на основі точного розв'язку рівняння Шредінгера визначено спектр водневоподібного донора у двошаровій КТ залежно від внутрішнього та повного радіусів КТ і величин потенціальної ями та потенціального бар'єра. Також визначено енергію зв'язку донора.

Однак у цих роботах з метою спрощення обчислень використовувалося наближення, що діелектричні проникності середовищ однакові

і дорівнюють середньому значенню. Такий підхід має очевидні недоліки. Особливо для гетеросистем, у яких існує велика відмінність між діелектричними проникностями. У роботі [5] враховано різницю між значеннями діелектричної проникності. Однак вибрана потенціальна енергія взаємодії іона домішки з електроном містить розрив на поверхні гетеросистеми. Урахування діелектричних проникностей КТ і матриці, а також поляризаційних зарядів, що виникають на межах гетеросистеми, можуть значно змінювати величину ефективної потенціальної ями [11].

Зважаючи на це все, у запропонованій роботі на основі точного розв'язку рівняння Пуассона для двошарової КТ з позитивно зарядженим іоном домішки у її центрі визначено потенціальну енергію взаємодії іона домішки з електроном, враховуючи різні значення діелектричних проникностей різних шарів КТ і матриці. Використовуючи знайдену потенціальну енергію, точно розв'язано рівняння Шредінгера для воднеподібної домішки у цій системі. Визначено вплив величини внутрішнього і зовнішнього радіусів КТ на енергетичний спектр електрона. Конкретні обчислення проведено для сферичної наногетеросистеми  $Si/SiO_2/Si$ .

## 2. Теорія

### 2.1. Потенціал позитивно зарядженої частинки у центрі двошарової сферичної КТ

Розглядається тришарова сферична наногетеросистема (двошарова КТ), модель якої зображено на рис. 1. У центрі такої системи розміщений позитивний заряд  $q$ . Радіус внутрішнього шару –  $a$ , зовнішнього –  $b$ , тому  $a \leq b$ . Внутрішній шар (область 1) має діелектричну проникність  $\epsilon_1$ , зовнішній шар КТ (область 2) має діелектричну проникність  $\epsilon_2$ , а діелектрична проникність матриці (область 3) дорівнює  $\epsilon_3$ .

Для того, щоб визначити потенціал, створений зарядом  $q$ , необхідно розв'язати рівняння Пуассона у трьох областях, яке внаслідок сферичної симетрії задачі має вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dr^2} \Phi_1(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \Phi_1(r) &= -\frac{4\pi q}{\epsilon_1} \delta(r), & r \leq a, \\ \frac{d^2}{dr^2} \Phi_2(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \Phi_2(r) &= 0, & a < r \leq b, \\ \frac{d^2}{dr^2} \Phi_3(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \Phi_3(r) &= 0, & r > b. \end{aligned} \quad (1)$$

Відповідні розв'язки цих рівнянь запишуться так:

$$\begin{aligned}\Phi_1(r) &= A_1 + \frac{A_2}{r}, & r \leq a, \\ \Phi_2(r) &= B_1 + \frac{B_2}{r}, & a < r \leq b, \\ \Phi_3(r) &= C_1 + \frac{C_2}{r}, & r > b.\end{aligned}\tag{2}$$

Невідомі коефіцієнти визначено з умов рівності потенціалу нулю на нескінченності, неперервності потенціалу та нормальної складової вектора індукції електричного поля на межах середовищ і теореми Гауса:

$$\begin{aligned}A_1 &= \frac{q(a\varepsilon_1(\varepsilon_2 - \varepsilon_3) + b\varepsilon_3(\varepsilon_1 - \varepsilon_2))}{\varepsilon_1\varepsilon_2\varepsilon_3ab}, & A_2 &= \frac{q}{\varepsilon_1}, & C_1 &= 0, \\ B_1 &= \frac{q(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)}{\varepsilon_2\varepsilon_3b}, & B_2 &= \frac{q}{\varepsilon_2}, & C_2 &= \frac{q}{\varepsilon_3}.\end{aligned}\tag{3}$$

Визначивши всі невідомі коефіцієнти, знайдено потенціал, який створює заряд  $q$  у центрі КТ.

## 2. 2. Водневоподібна домішка у центрі двошарової сферичної КТ

Нехай у центрі тришарової сферичної наногетероструктури  $Si/SiO_2/Si$  розміщений позитивно заряджений іон водневоподібної домішки ( $q = e$ ). Потенціальна енергія, що зумовлена розривом зон, набере вигляду:

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

Потенціальна енергія взаємодії електрона з іоном домішки, що одержана на основі розв'язку рівняння Пуассона (1), зобразиться формулою:

$$V(r) = e^2 \begin{cases} -\frac{1}{\varepsilon_1 r} - \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 a} - \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 b}, & r \leq a, \\ -\frac{1}{\varepsilon_2 r} - \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 b}, & a < r \leq b, \\ -\frac{1}{\varepsilon_1 r}, & r > b. \end{cases} \quad (5)$$

Тут враховано, що  $\varepsilon_3 = \varepsilon_1$ .

Електрон буде наводити поляризаційні заряди на границі поділу середовищ. Відповідну енергію взаємодії електрона з цими зарядами можна визначити за формулами [11 – 14]:

$$W(r) = \begin{cases} W_1(r), & r \leq a, \\ W_2(r), & a < r \leq b, \\ W_3(r), & r > b, \end{cases} \quad (6)$$

$$W_1(r) = \frac{e^2}{2a\varepsilon_1} \left( \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \right) \left\{ \frac{a^2}{a^2 - r^2} + \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} {}_2F_1 \left( 1, \alpha_1; \alpha_1 + 1; \left( \frac{r}{a} \right)^2 \right) \right\} \\ + \frac{e^2}{2a} \frac{\varepsilon_2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)} \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{r}{a} \right)^{2n} \frac{(2n+1)^2}{(\varepsilon_1 n + \varepsilon_2 (n+1)) n} \frac{1}{Z_n},$$

$$W_2(r) = \frac{e^2}{2a\varepsilon_2} \left( \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \right) \left\{ \frac{a^2}{a^2 - r^2} + \left( \frac{a}{r} \right)^2 {}_2F_1 \left( 1, \alpha_1; \alpha_1 + 1; \left( \frac{a}{r} \right)^2 \right) \right\} + \\ + \frac{e^2}{2b\varepsilon_2} \left( \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_2 + \varepsilon_1} \right) \left\{ \frac{b^2}{b^2 - r^2} + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} {}_2F_1 \left( 1, \alpha_2; \alpha_2 + 1; \left( \frac{r}{b} \right)^2 \right) \right\} + \\ + \frac{e^2}{2r\varepsilon_2} \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \left( \frac{a}{r} \right)^{2n+1} \frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)n}{(\varepsilon_1 n + \varepsilon_2 (n+1))} - \left( \frac{r}{b} \right)^{2n+1} \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)(n+1)}{(\varepsilon_2 n + \varepsilon_1 (n+1))} - 2 \right\} \frac{1}{Z_n},$$

$$W_3(r) = \frac{e^2}{2b\varepsilon_3} \left( \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_2 + \varepsilon_1} \right) \left\{ \frac{b^2}{b^2 - r^2} + \left( \frac{b}{r} \right)^2 {}_2F_1 \left( 1, \alpha_2; \alpha_2 + 1; \left( \frac{b}{r} \right)^2 \right) \right\} - \frac{e^2}{2r} \frac{\varepsilon_2}{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)} \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{b}{r} \right)^{2n+1} \frac{(2n+1)^2}{(\varepsilon_2 n + \varepsilon_1 (n+1))(n+1) Z_n},$$

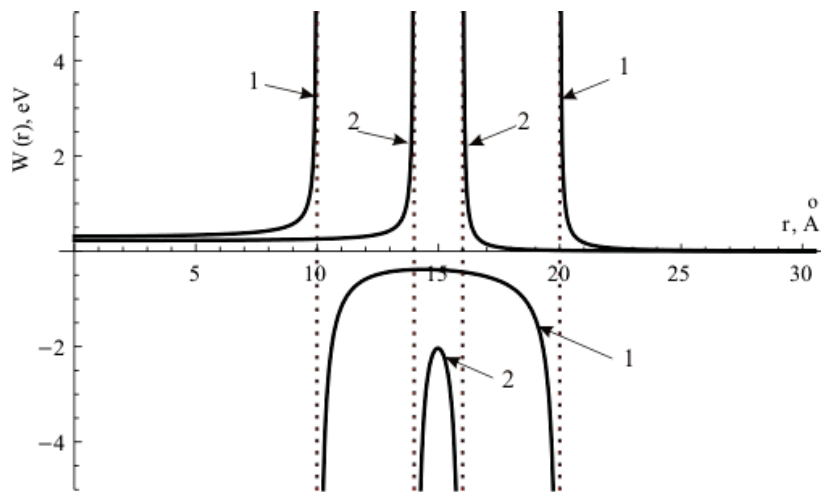
де

$$Z_n = 1 + \left( \frac{b}{a} \right)^{2n+1} \frac{1}{n(n+1)} \frac{(\varepsilon_1 n + \varepsilon_2 (n+1))(\varepsilon_2 n + \varepsilon_1 (n+1))}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)},$$

$$\alpha_1 = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}, \quad \alpha_2 = \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2 + \varepsilon_1}.$$

${}_2F_1(a, b, c; x)$  – узагальнена гіпергеометрична функція.

Потенціал  $W(r)$  для двох наборів розмірів КТ графічно зображено на рис. 1.



**Рисунок 1. Потенціальна енергія взаємодії електрона з наведеними зарядами**

$$(\mathbf{1}_- a = 10 \text{ \AA}, b = 20 \text{ \AA}, \mathbf{2}_- a = 14 \text{ \AA}, b = 16 \text{ \AA})$$

Якщо додати вирази (4), (5) і (6), то одержимо повну потенціальну енергію електрона у двошаровій КТ:

$$\Pi(r) = \begin{cases} W_1(r) + \frac{-e^2}{\varepsilon_1 r} - U_1^*(a, b), & r \leq a, \\ W_2(r) + \frac{-e^2}{\varepsilon_2 r} - U_2^*(a), & a < r \leq b, \\ W_3(r) + \frac{-e^2}{\varepsilon_1 r} - U_0, & r > b. \end{cases} \quad (7)$$

де введено ефективні потенціальні ями:

$$U_1^*(a, b) = \frac{e^2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 a} + \frac{e^2(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 b} + U_0, \\ U_2^*(b) = \frac{e^2(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 b}. \quad (8)$$

З (8) бачимо, що ефективні потенціальні ями залежать від розмірів гетеросистеми та діелектричних проникностей. Оператор повної енергії системи запишеться так:

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m^*(r)} \nabla + \Pi(r), \quad (9)$$

де

$$m^*(r) = \begin{cases} m_1^*, & r \leq a, \\ m_2^*, & a < r \leq b, \\ m_1^*, & r > b. \end{cases} \quad (10)$$

Рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (9) розв'язується точно, якщо знехтувати доданком  $W(r)$ , вплив якого буде враховано у першому порядку теорії збурень [11 – 14]. З рис. 1 бачимо, що на гетероме-

жах потенціали мають різні знаки і сильно відрізняються, однак при інтегруванні протилежні значення «компенсуються» і вплив залишається незначним.

Враховуючи сферичну симетрію задачі, хвильову функцію, що є розв'язком рівняння Шредінгера, можна подати у вигляді добутку радіальної та кутової складової:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (11)$$

де  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  – сферичні функції. Тоді можна записати радіальне рівняння Шредінгера для 3-х областей.

**1. Область  $r \leq a$ .** Радіальне рівняння Шредінгера має вигляд:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_1^* r^2} - \frac{e^2}{\varepsilon_1 r} - U_1^*(a, b) - E \right\} R_1(r) = 0 \quad (12)$$

У цій області можуть існувати стани з енергією як меншою, так і більшою за  $-U_1^*(a, b)$ . Тому рівняння (12) розглядається у цих двох діапазонах енергій. Нехай  $E < -U_1^*(a, b)$ . Якщо ввести безрозмірні величини за формулами:

$$\xi = \alpha_{1a} r; \quad \alpha_{1a}^2 = -8m_1^* (E + U_1^*(a, b)) / \hbar^2, \quad \lambda_1 = 2m_1^* e^2 / (\varepsilon_1 \hbar^2 \alpha_{1a}), \quad R_1(\xi) = \xi^{-1} \rho_1(\xi)$$

і здійснити нескладні перетворення, то рівняння (12) зведеться до такого:

$$\frac{\partial^2 \rho_1(\xi)}{\partial \xi^2} + \left[ -\frac{1}{4} + \frac{\lambda_1}{\xi} - \frac{l(l+1)}{\xi^2} \right] \rho_1(\xi) = 0 \quad (13)$$

Отримали рівняння Віттекера, яке має два лінійно незалежні розв'язки. Якщо врахувати умову скінченності хвильової функції у початку координат, то розв'язком рівняння (13) буде функція:

$$\rho_1(\xi) = C_{11} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{l+1} F(l+1 - \lambda_1, 2l+2, \xi), \quad (14)$$

де  $F(a, b, x)$  – гіпергеометрична функція 1-го роду.

Розглянемо іншу область енергій:  $-U_1^*(a, b) < E < -U_0$ . Увівши наступні позначення:



$$\xi = \alpha_{1b} r; \quad \alpha_{1b}^2 = 2m_1^*(E + U_1^*(a, b)) / \hbar^2, \quad \beta_1 = -m_1^* e^2 / (\varepsilon_1 \hbar^2 \alpha_{1b}), \quad R_1(\xi) = \xi^{-1} \rho_1(\xi)$$

рівняння (13) одержано у вигляді:

$$\frac{\partial^2 \rho_1(\xi)}{\partial \xi^2} + \left[ 1 - \frac{2\beta_1}{\xi} - \frac{l(l+1)}{\xi^2} \right] \rho_1(\xi) = 0 \quad (15)$$

Це рівняння Кулона. Розв'язок такого рівняння, що задовольняє умови скінченності хвильової функції, можна зобразити за допомогою гіпергеометричної функції. Тому розв'язок рівняння (15) у цьому діапазоні енергій запишеться так:

$$\rho_1(\xi) = C_{11} \frac{2^l e^{-\frac{\pi\beta_1}{2}} |\Gamma(l+1+i\beta_1)|}{\Gamma(2l+2)} e^{-i\xi} \xi^{l+1} F(l+1-i\beta_1, 2l+2, 2i\xi) \quad (16)$$

де  $\Gamma(z)$  – гамма-функція Ейлера.

**2. Область  $a < r \leq b$**  Радіальне рівняння Шредінгера:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_2^*} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_2^* r^2} - \frac{e^2}{\varepsilon_2 r} - U_2^*(b) - E \right\} R_2(r) = 0 \quad (17)$$

після введення безрозмірних величин та інших параметрів:

$$\xi = \alpha_2 r; \quad \alpha_2^2 = -8m_2^*(E + U_2^*(b)) / \hbar^2, \quad \lambda_2 = 2m_2^* e^2 / (\varepsilon_2 \hbar^2 \alpha_2), \quad R_2(\xi) = \xi^{-1} \rho_2(\xi)$$

перетвориться у рівняння Віттекера:

$$\frac{\partial^2 \rho_2(\xi)}{\partial \xi^2} + \left[ -\frac{1}{4} + \frac{\lambda_2}{\xi} - \frac{l(l+1)}{\xi^2} \right] \rho_2(\xi) = 0 \quad (18)$$

Розв'язком цього рівняння є дві функції лінійно незалежні функції.

Тому

$$\rho_2(\xi) = C_{21} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{l+1} F(l+1-\lambda_2, 2l+2, \xi) + C_{22} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{-l} \Phi(-l-\lambda_2, -2l, \xi) \quad (19)$$

де  $\Phi(a, b, x)$  – вироджена гіпергеометрична функція 2-го роду.

**3. Область  $r > b$**  Радіальне рівняння у цій області записано так:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_1^* r^2} - \frac{e^2}{\varepsilon_1 r} - U_0 - E \right\} R_3(r) = 0 \quad (20)$$

Визначаючи безрозмірні величини:

$$\xi = \alpha_3 r; \quad \alpha_3^2 = -8m_1^*(E + U_0)/\hbar^2, \quad \lambda_3 = 2m_1^* e^2 / (\varepsilon_1 \hbar^2 \alpha_3), \quad R_3(\xi) = \xi^{-1} \rho_3(\xi)$$

рівняння (20) перетворюємо у рівняння Віттекера:

$$\frac{\partial^2 \rho_3(\xi)}{\partial \xi^2} + \left[ -\frac{1}{4} + \frac{\lambda_3}{\xi} - \frac{l(l+1)}{\xi^2} \right] \rho_3(\xi) = 0 \quad (21)$$

Тоді рівняння (21) має вигляд:

$$\rho_3(\xi) = C_{31} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{-l} \Phi(-l - \lambda_3, -2l, \xi) \quad (22)$$

Функцію  $\rho_3(\xi)$  можна записати і в інтегральному зображенні:

$$\rho_3(\xi) = C_{31} \frac{e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{-l}}{\Gamma(-l - \lambda_3)} \int_0^\infty dt e^{-\xi t} t^{-l - \lambda_3 - 1} (1+t)^{-l + \lambda_3 - 1}$$

У випадку  $E > -U_2^*(b) - \frac{e^2}{\varepsilon_1 b}$  енергетичний спектр стає неперервним, а при  $-U_0 < E < -U_2^*(b) - \frac{e^2}{\varepsilon_1 b}$  існують квазістаціонарні стани.

Надалі розглядається дискретний спектр. Хвильова функція та потік густини ймовірності мають бути неперервними на межах гетероструктури. З цих умов, а також умови нормування можна визначити власні значення та власні функції водневоподібної домішки у двошаровій КТ. Поляризаційний доданок (6) можна врахувати в першому порядку теорії збурень [11-14]

$$E_{pol} = \int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}) W(r) \psi(\vec{r}). \quad (23)$$

Таким способом можна визначити повну енергію електрона у двошаровій КТ.

### 3. Результати обчислень та їхній аналіз

Розрахунок дискретного енергетичного спектра для електрона проведено для гетеросистеми, параметри якої такі:  $m_1^* = 0.25$ ,  $m_2^* = 0.5$ ,  $\varepsilon_1 = 11.7$ ,  $\varepsilon_2 = 2.4$ ,  $U_0 = 3.2\text{eV}$ . Одержані розв'язки добре узгоджуються з розв'язками роботи [10], якщо в отримані формули замість  $\varepsilon_1$  та  $\varepsilon_2$  підставити середнє значення діелектричної проникності, бо  $U_1^*(a,b) = U_0$ . Структура розв'язків та порядок слідування енергетичних рівнів збігається з обчисленими у попередніх роботах. Однак урахування наведеного розв'язку рівняння Пуассона якісно вплине на поведінку енергетичних станів при зміні розмірів гетероструктури.

На рис. 2 представлено залежність основного стану донора від внутрішнього радіуса КТ (зовнішній радіус  $b = 180\text{Å}$ ). Якщо в обчисленнях вважати, що значення діелектричної проникності для всіх шарів гетероструктури однакове за умови  $\varepsilon_2 = \varepsilon_1 \equiv \varepsilon_{SiO_2}$ , то залежність енергії від радіуса матиме вигляд 1. Коли ж припустити, що  $\varepsilon_2 = \varepsilon_1 \equiv \varepsilon_{Si}$ , то  $E(a)$  описується кривою 2, а якщо вважати, що  $\varepsilon_2 = \varepsilon_1 \equiv (\varepsilon_{SiO_2} + \varepsilon_{Si})/2$ , то енергія основного стану, як функція  $a$  зобразиться кривою 3. Усі ці три функції мають однакову структуру. Для великого радіуса КТ, коли  $a \approx b$ , вплив шару  $SiO_2$  зменшується, тому енергетичні рівні гетеросистеми прямують до відповідних енергій водневоподібної домішки у масивному кристалі  $Si$ , що зменшені на величину потенціальної ями  $U_0$  (глибину потенціальної ями). Якщо  $a_0 < a < b$  ( $25\text{Å} < a_0 < 50\text{Å}$ ), то зменшення внутрішнього радіуса КТ спричинює зростання енергії системи через просторове обмеження. Подальше зменшення радіуса ( $a < a_0$ ) веде до того, що збільшення кінетичної енергії компенсується потенціальною енергією притягання електрона до іона домішки. Тому у цьому діапазоні енергія практично не залежить від внутрішнього радіуса КТ.

Врахування того, що діелектричні проникності шарів гетероструктури різні на основі точного розв'язку рівняння Пуассона та Шредінгера, одержано функцію  $E = E(a)$ , яка має немонотонний характер

(крива 4). В області  $a \approx b$ , енергія визначається  $E = E_{Si}$ , тому криві 2 і 4 для великих радіусів  $a$  збігаються одна з одною. Зменшення внутрішнього радіуса КТ веде спочатку до зменшення енергії електрона, а далі – до її зростання. Пониження енергетичного рівня при зменшенні радіуса  $a$  зумовлено зростанням ефективної глибини потенціальної ями  $U_1^*(a,b)$ , а зростання енергії викликано просторовим обмеженням. Подальше зменшення радіуса веде до того, що домішка починає вести себе як водневоподібний атом у масивному кристалі кремнію. У цьому діапазоні відсутня різка зміна енергії і криві 2 та 4 знову наближаються одна до одної. Якщо врахувати доданок (6), то функція  $E = E(a)$  буде описуватися кривою 5. Як бачимо з рисунка, потенціал самодії (6) дає невеликий внесок в енергію основного стану електрона донора. Наприклад, для  $a = 40 \text{ \AA}$ ,  $b = 180 \text{ \AA}$ ,  $E_{pol} = 0.07032 \text{ eV}$ , а для  $a = 100 \text{ \AA}$ ,  $b = 180 \text{ \AA}$ ,  $E_{pol} = 0.02813 \text{ eV}$ . Тому надалі в обчисленнях вплив доданку (6) не буде враховуватися.

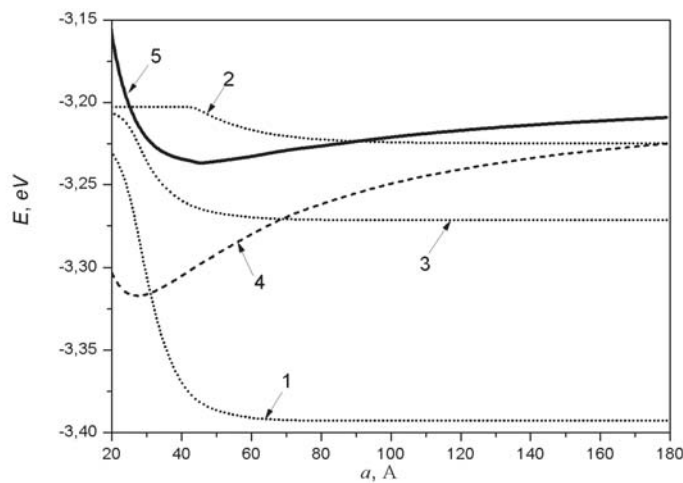
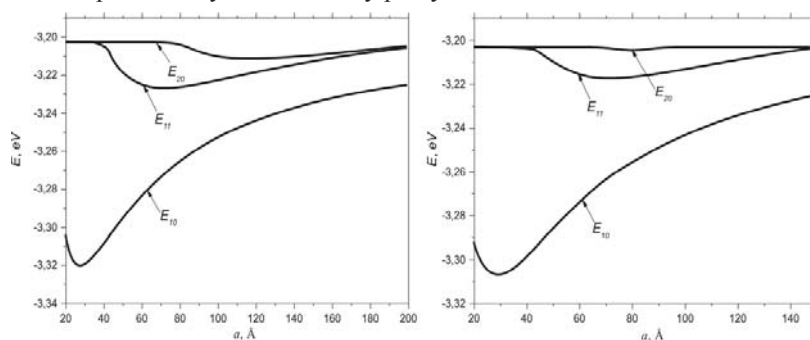


Рисунок 2. Залежність енергії основного стану донора у двошаровій КТ від внутрішнього радіуса КТ

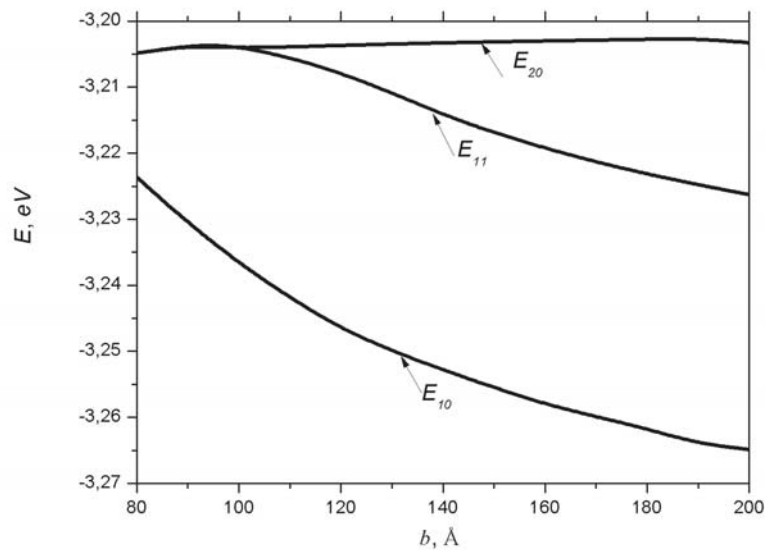
Крім основного стану, визначено також і збуджені стани. Енергетичні рівні задаються радіальними та орбітальними квантовими числами  $n_r, l$ . На рис. 3 показано залежність  $E_{n,l}$  від внутрішнього радіуса КТ при сталому зовнішньому радіусі.



**Рисунок 3. Залежність енергії водневоподібної домішки у двошаровій КТ від внутрішнього радіуса КТ. Зовнішній радіус  $b = 200 \text{ \AA}$  (зліва),  $b = 150 \text{ \AA}$  (справа)**

Бачимо, що при зростанні товщини потенціального бар'єра (зменшення внутрішнього радіуса при сталому зовнішньому) до певної величини ( $a \approx 25 \text{ \AA}$ , якщо  $b \approx 200 \text{ \AA}$ )  $2s$  та  $1p$  енергетичні стани, які вироджені у вільному водневоподібному атомі, розщеплюються.

На рис. 4 зображено графічно залежність  $E_{n,l}$  від зовнішнього радіуса КТ при фіксованому внутрішньому  $a = 80 \text{ \AA}$ . Як бачимо з рисунка, зменшення зовнішнього радіуса  $b$  КТ спричинює зростання енергії системи. Це зумовлено зменшенням глибини ефективної потенціальної ями  $U_1^*(a,b)$  і збільшенням висоти бар'єру  $U_2^*(b)$ .



**Рисунок 4. Залежність енергетичних рівнів водневоподібної домішки від зовнішнього радіуса КТ**

Отже, у роботі одержано точний розв'язок рівняння Пуассона для позитивно зарядженого іона домішки у центрі тришарової сферичної наногетероструктури (двошарової КТ), що дало можливість записати повну потенціальну енергію електрона через ефективні потенціальні ями для електрона у гетероструктурі. З визначеною потенціальною енергією точно розв'язано рівняння Шредінгера для дискретного спектра водневоподібної домішки. Обчислення показали, що врахування різних значень діелектричних проникностей гетеросистеми значно змінюють енергетичний спектр водневоподібної домішки у тришаровій сферичній наногетероструктурі. Отримано залежність квадрата матричного елемента дипольного моменту міжрівневих переходів, побудованого на хвильових функціях  $1s$  та  $1p$  станів, від розмірів наногетероструктури.

#### *Література*

1. 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.

2. Zhu J.-L. Confined electron and hydrogenic donor states in a spherical quantum dot of GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As / J. -L.Zhu, J. -J.Xiong, B. -L.Gu // Phys.Rev.B. – 1990. – Vol.41, № 9. – P. 6001 – 6007.
3. 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.
4. Yang C.-C. Eigenstates and fine structure of a hydrogenic impurity in aspherical quantum dot / C. -C.Yang, L. -C.Liu, and S. -H.Chang // Phys.Rev.B. – 1998. – Vol. 58, № 4. – P. 1954 –1961.
5. Ткач М. В. Спектрівхвильові функції воднеподібної домішки, розміщеної в центрі квантової точки / М. В. Ткач, В. А. Головацький, Я. М. Березовський // Фіз.і хім. тверд. тіла. – 2003. – Т. 4, № 2. – С. 213 – 220.
6. Schooss D. Quantum-dot quantum well CdS/HgS/CdS: Theory and experiment / D.Schooss, A.Mews, A.Eychmuller [and al. ] // Phys.Rev.B.–1994. – Vol. 49, № 24. – P. 17072 –17078.
7. Mews A. Preparation, characterization, and photophysics of the quantum dot quantum well system cadmium sulfide/mercury sulfide/cadmium sulfide / A.Mews, A.Eychmuller, M.Giersig [and al. ] // J.Phys. Chem. – 1994. – Vol. 98, № 3. – P. 934 – 941.
8. Ткач Н. В. Квазистационарные состояния электрона в сферической наногетеросистеме  $\beta-HgS / \beta-CdS / \beta-HgS$  / Н. В.Ткач, В. А.Головацкий // ФТТ.– 1999. – Т. 41, № 11. – С. 2081 – 2083.
9. Chaudhuri S. Hydrogenic-impuritygroundstateinGaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>Asmultiple-quantum-wellstructures / S.Chaudhuri // Phys.Rev.B. – 1983. – Vol. 28. – P. 4480 – 4488.
10. Hsieh C.-Y. Lower Lying States of Hydrogenic Impurity inA Multi-Layer Quantum Dot / C.-Y.Hsieh // Chinese Journal of Physics. – 2000. – Vol. 38, № 3-I. – P. 478 – 490.
11. Бойчук В. І. Дослідження впливу поляризації на енергію електрона, дірки сферичної наногетеросистеми напівпровідників (на прикладі структур Si/SiO<sub>2</sub>,  $\beta$ -HgS/CdS) / В. І. Бойчук, Р. Ю. Кубай, Г. М. Годованець [та ін. ] // ЖФД. – 2006. – Т. 10, № 3. – С.220 –226.
12. Келдыш Л. В. Эффекты поляризации при межзонном поглощении света в полупроводниках в сильном электрическом поле / Л. В. Келдыш, О. В. Константинов, В. И. Перель // ФТП. – 1969. – Т.3, № 7. – С.1042 – 1053.
13. Ефремов Н. А. Макроскопические локальные зарядовые состояния в ультрадисперсных средах / Н. А. Ефремов, С. И. Покутний // ФТТ. – 1985. – Т. 27, № 1. – С.48 – 56.
14. Бойчук В. І. Вплив сил зображень на енергетичний спектр електрона у складному сферичному мікрокристалі  $CdS / \beta-HgS / H_2O$  / В. І. Бойчук, Р. Ю. Кубай, І. В. Білинський // ЖФД.– 1999. – Т. 3, № 2. – С.187 – 191.