

В.А. Головацький, І.Б. Бернік

## Сили осцилятора внутрішньозонних квантових переходів у сферичній квантовій точці $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ з центральною донорною домішкою

*Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,  
м. Чернівці, вул. Коцюбинського 2, тел. 80372244816, e-mail: [kff@chnu.edu.ua](mailto:kff@chnu.edu.ua)*

На основі енергетичного спектру та хвильових функцій електрона у сферичній багатошаровій наносистемі  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  з центральною воднеподібною домішкою, отриманих у наближенні ефективних мас та прямокутних потенціальних бар'єрів, розраховано розподіл густини ймовірності знаходження квазічастинки у наносистемі та досліджено вплив домішки на сили осциляторів внутрішньозонних переходів.

Отримано залежності інтенсивності квантових переходів електрона з основного (1s) стану в збуджені 1р та 2р стани від геометричних розмірів наносистеми. Показано, що для кожного квантового переходу існують свої діапазони розмірів наносистеми, при яких сили осцилятора досягають максимальних значень. Наявність донорної домішки суттєво впливає як на розподіл густини ймовірності розподілу електрона в наносистемі, так і на сили осциляторів квантових переходів.

**Ключові слова:** багатошарова квантова точка, донорна домішка, внутрішньозонні квантові переходи, сили осцилятора.

*Стаття поступила до редакції 02.11.2012; прийнята до друку 15.06.2013.*

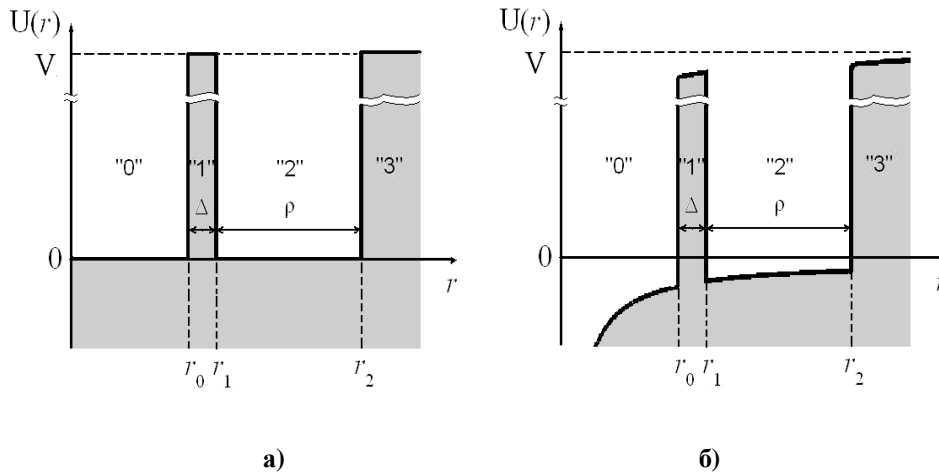
### Вступ

Сучасні нанотехнології дозволяють створювати ряд напівпровідникових приладів на основі наногетеросистем. Сферичні квантові точки широко використовуються як джерела випромінювання електромагнітних хвиль в широкому спектральному діапазоні: від інфрачервоної області (одиниць мікрометрів) до ближнього ультрафіолетового випромінювання (350 нм). Багатошарові квантові точки, що синтезуються з різних напівпровідникових матеріалів мають більшу ефективність випромінювання за рахунок локалізації квазічастинки у внутрішніх шарах наносистеми, де менше можливостей для безвипромінювальної дисипації енергії. При різній локалізації квазічастинки відбувається зміна спектру випромінювання, що може бути використаним в різноманітних напівпровідникових мітках та сенсорах для використання в медицині [1, 2]. Крім цього в багатошарових сферичних квантових точках можливе одночасне випромінювання електромагнітних хвиль з різною довжиною, на яку можна впливати зміною розмірів відповідних шарів наносистеми. Тому багатошарові наносистеми мають перспективу застосування в наноелектроніці та в якості джерел білого світла [3].

Наявність домішок суттєво впливає на властивості наноструктур, що, в свою чергу, відображається на фізичних характеристиках приладів, створених на їх основі.

Низка робіт присвячена теоретичним дослідженням простих квантових точок з домішками [4 - 7]. В роботах [4 - 6] розраховано енергії електрона та сили осциляторів квантових переходів в простій квантовій точці з центральною домішкою. В [7] отримано залежності сили осцилятора внутрішньозонних квантових переходів та лінійного і нелінійного коефіцієнтів поглинання світла в простій КТ з нецентральною домішкою від положення домішки.

Дослідження багатошарових напівпровідникових наносистем без домішок та з домішками проводиться багатьма авторами в рамках різних теоретичних моделей [8 - 12]. В роботі [8] досліджено енергетичний спектр та хвильові функції електрона в сферичній двоямній КТ без домішки. Автори роботи [9] виконали дослідження впливу домішки на енергетичний спектр та хвильові функції електрона в КТ  $\text{CdSe}/\text{ZnSe}$ /матриця. Роботи [10 - 12] присвячені дослідженням властивостей багатошарових сферичних напівпровідникових наносистем, зокрема в роботі [12], числовими методами розв'язано рівняння Шредінгера та розраховано сили



**Рис. 1.** Потенціальна енергія електрона в багат шаровій квантовій точці GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As а) без домішки, б) з центральною домішкою.

осциляторів 1s-1p квантового переходу та коефіцієнт поглинання в багат шаровій квантовій точці GaAs/AlGaAs/GaAs/AlGaAs без домішки та з воднеподібною домішкою, розташованою в центрі. Проте, переходи у вищі стани не досліджувались.

В запропонованій роботі на основі точних розв'язків рівняння Шредінгера в наближенні ефективних мас та прямокутних потенціальних бар'єрів досліджено залежність енергетичного спектру та еволюцію розподілу густини ймовірності локалізації електрона в наносистемі GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As з центральною донорною домішкою від ширини потенціальних ям та товщини потенціального бар'єра, що їх розділяє. Виконано розрахунки залежності сили осцилятора квантових переходів 1s-1p та 1s-2p від геометричних розмірів наносистеми.

## I. Спектр та хвильові функції електрона у багат шаровій сферичній Кт GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As

Розглядається електрон в багат шаровій сферичній наносистемі, що складається з ядра GaAs (середовище «0») та двох сферичних оболонок Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As та GaAs (середовище «1», «2»), помічених у напівпровідникову матрицю Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As (середовище «3»); товщина бар'єра Δ, ширина зовнішньої потенціальної ями – ρ. Потенціал розмірного квантування електрона в наносистемі зображений на рис. 1,а). В центрі сферичної наносистеми розташована донорна домішка, яка додатково створює притягуючий кулонівський потенціал (рис. 1,б).

Рівняння Шредінгера для електрона в сферичній квантовій точці з центральною донорною домішкою має наступний вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \nabla^2 \frac{1}{m(r)} \nabla^2 Y_{nlm}(\mathbf{r}) + [U(r) - \frac{e^2}{er}] Y_{nlm}(\mathbf{r}) = E_{nl} Y_{nlm}(\mathbf{r}) \quad (1)$$

Ефективні маси та потенціальна енергія електрона задаються виразами (2), (3) відповідно:

$$m(r) = \begin{cases} m_0, & r \leq r_0, \quad r_1 < r \leq r_2, \\ m_1, & r_0 < r \leq r_1, \quad r > r_2 \end{cases} \quad (2)$$

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq r_0, \quad r_1 < r \leq r_2, \\ V, & r_0 < r \leq r_1, \quad r > r_2 \end{cases} \quad (3)$$

Величина  $e$  у загальному випадку є функцією координат квазічастинки та параметрів квантової точки і відіграє роль ефективної діелектричної

проникності, що враховує особливості кулонівської взаємодії в неоднорідному діелектричному середовищі. При невеликих різницях в діелектричних постійних різних шарів наносистеми значення цієї функції буде близьким до значення діелектричної постійної напівпровідникового середовища ядра наносистеми, в якому знаходиться донорна домішка.

Враховуючи сферичну симетрію задачі, з (1) отримуємо рівняння для радіальної частини хвильової функції:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\mathbf{l}(\mathbf{l}+1)}{r^2} \right) R_{n\mathbf{l}}(r) - \frac{e^2}{er} R_{n\mathbf{l}}(r) = E_{n\mathbf{l}} R_{n\mathbf{l}}(r), \quad r \leq r_0, r_1 < r \leq r_2 \quad (4)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\mathbf{l}(\mathbf{l}+1)}{r^2} \right) R_{n\mathbf{l}}(r) + \left( V - \frac{e^2}{er} \right) R_{n\mathbf{l}}(r) = E_{n\mathbf{l}} R_{n\mathbf{l}}(r), \quad r_0 < r \leq r_1, r > r_2 \quad (5)$$

Загальні розв'язки рівнянь (5) і (6) мають вигляд [5]:

$$R_{n\mathbf{l}}(r) = \begin{cases} A^{(i)} e^{-x_0 r/2} r^{\mathbf{l}} \left[ F(\mathbf{l}+1-h_0, 2\mathbf{l}+2, x_0 r) + \right. \\ \left. + B^{(i)} G(\mathbf{l}+1-h_0, 2\mathbf{l}+2, x_0 r) \right], & r \leq r_0, r_1 < r \leq r_2 \\ A^{(i+1)} e^{-x_1 r/2} r^{\mathbf{l}} \left[ F(\mathbf{l}+1-h_1, 2\mathbf{l}+2, x_1 r) + \right. \\ \left. + B^{(i+1)} G(\mathbf{l}+1-h_1, 2\mathbf{l}+2, x_1 r) \right], & r_0 < r \leq r_1, r > r_2 \end{cases}, \quad i=0,2 \quad (6)$$

де  $F(a, b, z)$  та  $G(a, b, z)$  – вироджені гіпергеометричні функції першого та другого роду,

$$x_0 = \frac{\sqrt{8m_0(-E_{n\mathbf{l}})}}{\hbar}, \quad h_0 = \pm \frac{2m_0 e^2}{e x_0 \hbar^2},$$

$$x_1 = \frac{\sqrt{8m_1(V_0 - E_{n\mathbf{l}})}}{\hbar}, \quad h_1 = \frac{2m_1 e^2}{e x_1 \hbar^2} \quad (7)$$

(знак “+” для  $E_{n\mathbf{l}} > 0$ , знак “-” для  $E_{n\mathbf{l}} < 0$ ).

Коефіцієнти  $B^{(0)} = 0$  та  $A^{(3)} = 0$  з умов скінченності хвильової функції при  $r = 0$  та  $r \rightarrow \infty$ .  
Всі інші коефіцієнти, а також енергія електрона  $E_{n\mathbf{l}}$  визначаються з умов неперервності хвильових функцій та потоків густини ймовірності перебування електрона в наносистемі на межах поділу середовищ

$$\begin{cases} R_{n\mathbf{l}}^{(i)}(r_i) = R_{n\mathbf{l}}^{(i+1)}(r_i) \\ \left. \frac{1}{m_i} \frac{\partial R_{n\mathbf{l}}^{(i)}(r)}{\partial r} \right|_{r_i} = \left. \frac{1}{m_{i+1}} \frac{\partial R_{n\mathbf{l}}^{(i+1)}(r)}{\partial r} \right|_{r_i}, \quad i=0,1,2 \end{cases} \quad (8)$$

та умови нормування

$$\int_0^\infty |R_{n\mathbf{l}}(r)|^2 dr = 1 \quad (9)$$

Сила осциляторів внутрішньозонних квантових переходів у дипольному наближенні записується [6]:

$$F_{i-f} = \frac{2m^*}{e^2 \hbar^2} (E_f - E_i) |M_{i,f}|^2 \quad (10)$$

де  $M_{i,f}$  – дипольний момент переходу, який виражається формулою:

$$M_{i,f} = \int \mathbf{y}_f^*(\mathbf{r}) e r \cos q \mathbf{y}_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (11)$$

Правила відбору для внутрішньозонних квантових переходів мають вигляд  $\Delta \mathbf{l} = \pm 1$  [12]. В

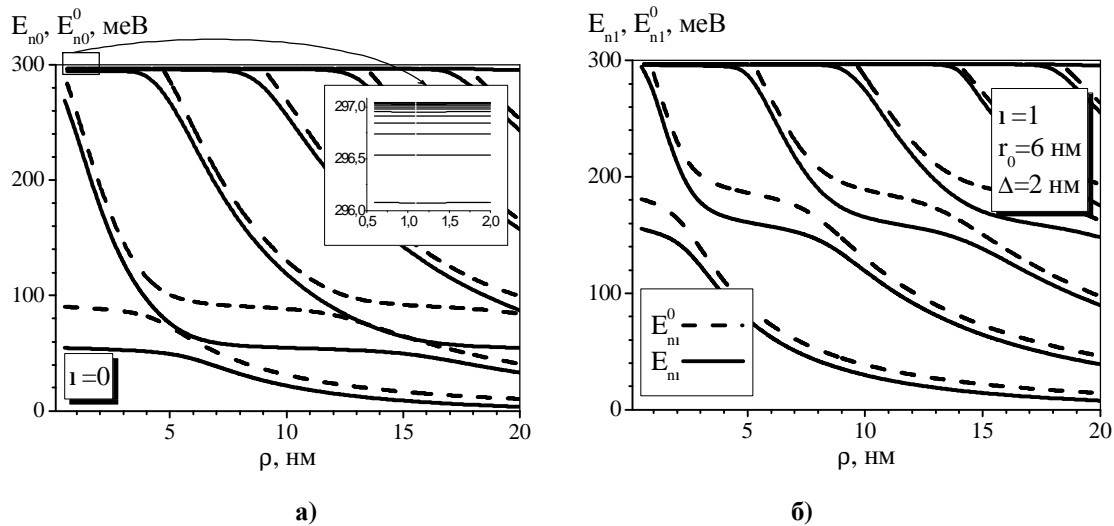
даній роботі числові розрахунки виконувались для переходів електрона з основного стану в 1р- та 2р-стани.

## II. Результати числових розрахунків

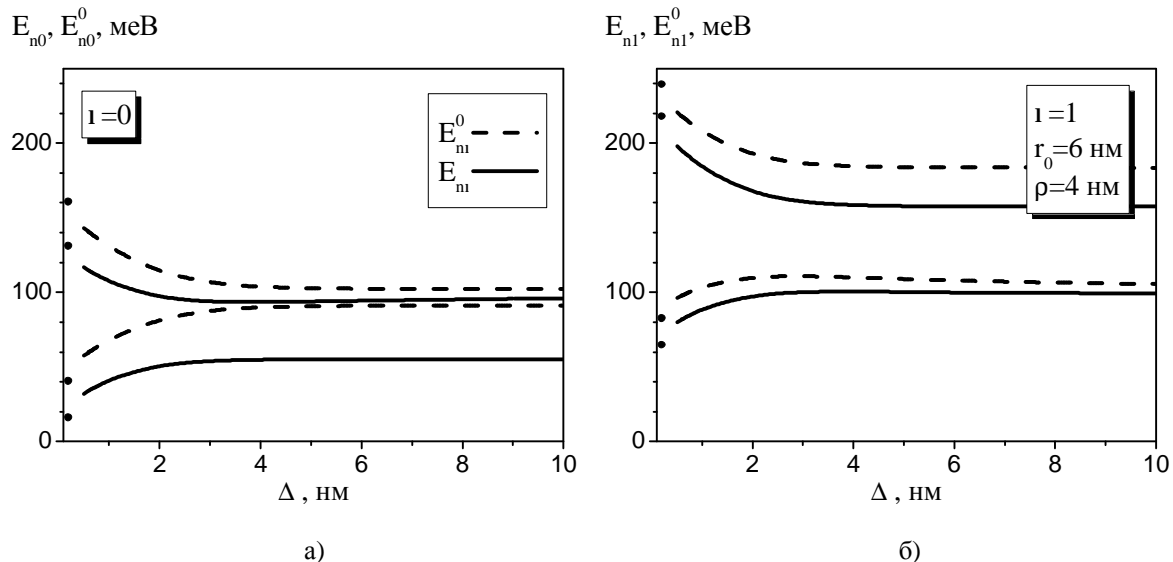
У числових розрахунках використовувались параметри наносистеми  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  при концентрації  $\text{Al } x=0$  для потенціальних ям та  $x=0,4$  для потенціальних бар'єрів:  $m_0 = 0,067 m_e$ ,  $m_1 = (0,067 + 0,083x) m_e$ ,  $V = 0,57(1,155x + 0,37x^2) \text{ eV}$ ,  $e_0 = 12,9$ ,  $e_1 = 12,9 - 2,84x$ .

Результати числових розрахунків залежності енергії основного та збуджених станів від ширини зовнішньої потенціальної ями  $\rho$  при фіксованому розмірі ядра  $r_0 = 6i$  та товщині бар'єра  $\Delta = 2i$  наведено на рис. 2,а) - стани електрона з  $\mathbf{l} = 0$  та 2 б) - стани електрона з  $\mathbf{l} = 1$ . Для порівняння на графіках штриховими лініями зображено енергію електрона в квантовій точці без домішки з відповідними розмірами. Як видно з рисунка, залежність кожної з енергій від розміру зовнішньої потенціальної ями має немонотонно спадний характер. Така поведінка енергій електрона пояснюється його різною локалізацією в наносистемі. Області малої зміни енергії відповідають випадку розміщення квазічастинки в ядрі наносистеми. Тоді зміна ширини зовнішньої ями мало впливає на її стан. Коли електрон у певному стані локалізований у зовнішній ямі, то збільшення її розмірів приводить до зменшення енергії електрона. З рисунка також видно, що домішка більше впливає на енергію електрона, локалізованого в ядрі наносистеми, причому вплив на s-стани більший, ніж на p-стани.

Крім того, як видно на вставці рис. 2,а, в області



**Рис. 2.** Залежність енергії електрона від ширини зовнішньої потенціальної ями  $r$  при фіксованому розмірі ядра  $r_0 = 6 \text{ нм}$  та товщині бар'єра  $\Delta = 2 \text{ нм}$  в а) s-станах та б) р-станах у випадку наявності (суцільна крива) чи відсутності (штрихова лінія) домішки.



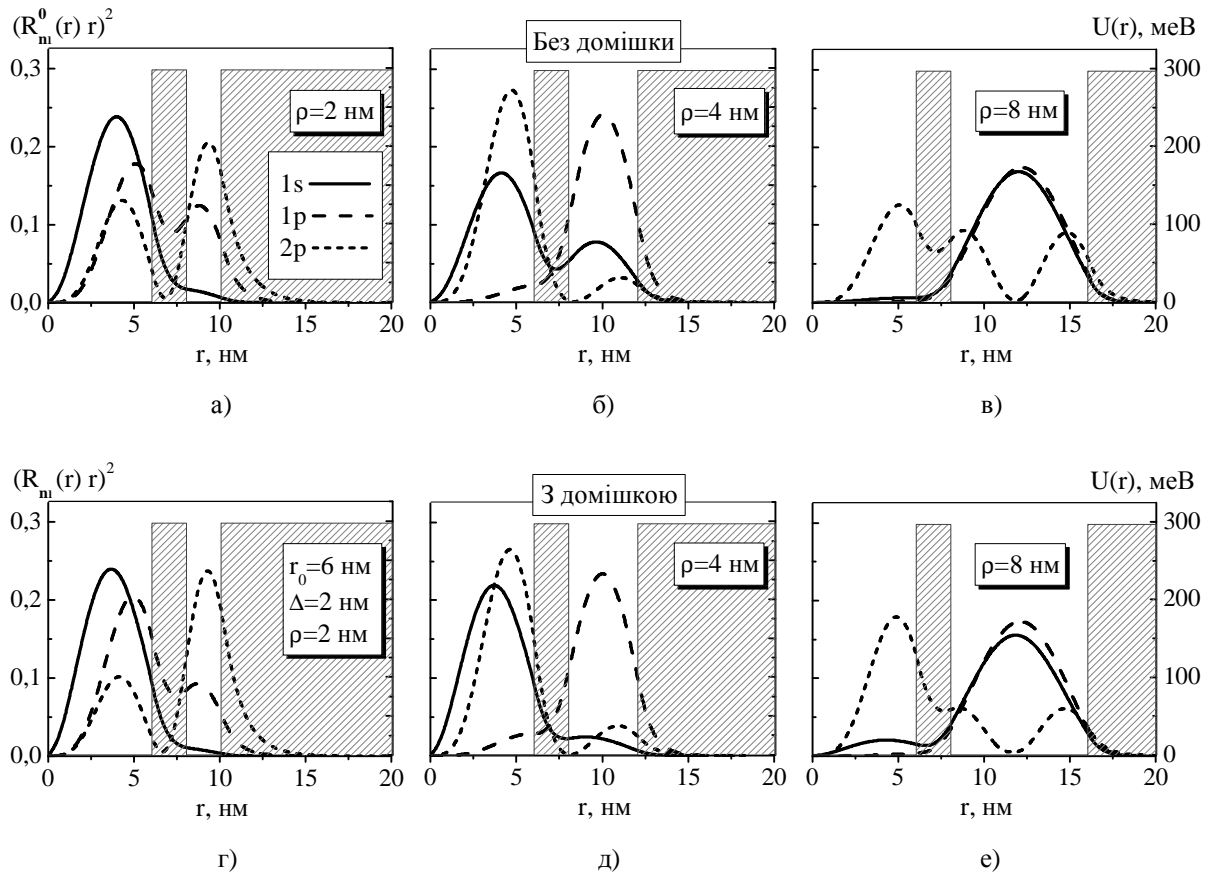
**Рис. 3.** Залежність енергії електрона від товщини бар'єра  $\Delta$  при фіксованому розмірі ядра  $r_0 = 6 \text{ нм}$  та ширині зовнішньої потенціальної ями  $r = 4 \text{ нм}$  в а) s-станах та б) р-станах у випадку наявності (суцільна крива) чи відсутності (штрихова лінія) домішки.

енергій  $E_{n1} \approx V$  утворюється воднеподібний спектр завдяки вигляду потенціалу  $U(r)$  при  $r > r_2$ .

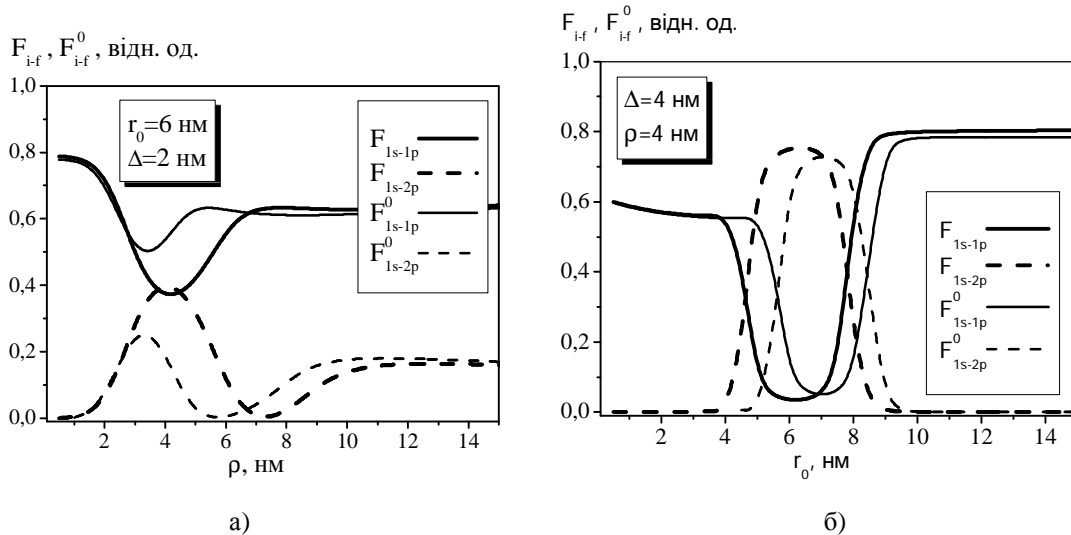
Залежність енергетичного спектру електрона від товщини потенціального бар'єра при фіксованому радіусі ядра  $r_0 = 6 \text{ нм}$  та товщині зовнішньої оболонки  $r = 4 \text{ нм}$  зображено на рис. 3. З графіків видно, що значення енергій електрона всіх станів мало залежать від товщини потенціального бар'єра (при  $\Delta > 4 \text{ нм}$ ). При  $\Delta \rightarrow 0$  двомяна квантова точка вироджується в просту КТ з радіусом, рівним сумі ширин потенціальних ям, а енергетичний спектр електрона в наносистемі при цьому прямує до відповідних значень енергій в простій КТ з донорною домішкою (точки на рис. 3).

З рис. 3 також видно, що домішка по-різному впливає на енергію електрона в різних станах. При вибраних розмірах системи, домішка суттєво впливає на енергію електрона в 1s-стані, але менше на енергію квазічастинки в 2s-стані, проте для р-станів спостерігається протилежне: менший вплив домішки на 1р-стан та сильніший на 2р-стан. Це пояснюється розподілом густини ймовірності знаходження квазічастинки в наносистемі. Електрон в 1s та 2р станах в основному локалізований в ядрі КТ, де вплив кулонівського потенціалу максимальний, а в 2s та 1р-станах – в зовнішній потенціальній ямі, де вплив домішки слабший.

На рис. 4 наведено розподіл густини ймовірності знаходження електрона в наносистемі при різних розмірах зовнішньої потенціальної ями. Збільшення



**Рис. 4.** Розподіл радіальної ймовірності знаходження електрона в наносистемі без домішки (а-в) та з домішкою (г-е) при радіусі ядра  $r_0 = 6 \text{ нм}$ , товщині бар'єра  $\Delta = 2 \text{ нм}$  та  $r = 2, 4, 8 \text{ нм}$

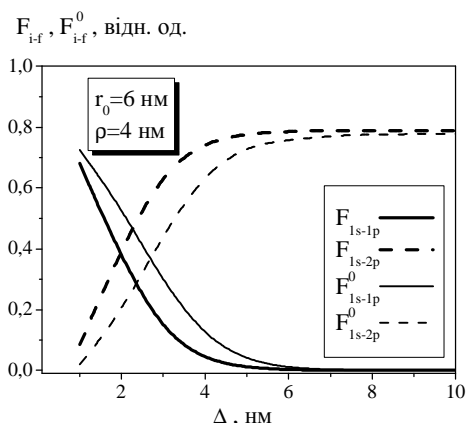


**Рис. 5.** Залежність сили осцилятора внутрішньозонних квантових переходів від а) ширини зовнішньої потенціальної ями  $r$  при фіксованому розмірі ядра  $r_0 = 6 \text{ нм}$  та товщині бар'єра  $\Delta = 2 \text{ нм}$ ; б) радіуса ядра квантової точки  $r_0$  при фіксованих товщинах оболонок:  $\Delta = 4 \text{ нм}$ ,  $r = 4 \text{ нм}$ .

ширини ями приводить до зміни локалізації електрона в різних станах, що відображається на залежності сили осцилятора квантових переходів.

Залежності сил осциляторів  $F_{1s-1p}$ ,  $F_{1s-2p}$  (з домішкою) та  $F_{1s-1p}^0$ ,  $F_{1s-2p}^0$  (без домішки) від

розмірів потенціальних ям КТ наведено на рис. 5. З рисунка видно, що залежності сил осциляторів квантових переходів 1s-1p та 1s-2p якісно відрізняються. Наявність домішки впливає на положення та величини максимальних та мінімальних значень відповідних залежностей.



**Рис. 6.** Залежність сили осцилятора 1s-1p та 1s-2p квантових переходів від товщини бар'єра  $\Delta$  при фіксованому розмірі ядра  $r_0 = 6 \text{ нм}$  та ширині зовнішньої потенціальної ями  $r = 4 \text{ нм}$ .

Поведінку кривих  $F_{1s-1p}$ ,  $F_{1s-2p}$ ,  $F_{1s-1p}^0$ ,  $F_{1s-2p}^0$  на рис. 5,а можна пояснити з розподілів густини ймовірності знаходження електрона в наносистемі при різних розмірах зовнішньої потенціальної ями, наведених на рис. 4. Мінімум кривої  $F_{1s-1p}$  на рис. 5,а відповідає найменшому перекриттю хвильових функцій 1s та 1p станів електрона при  $r = 4 \text{ нм}$  (рис. 4,д). При цих же розмірах наносистеми перекриття хвильових функцій 1s та 2p станів найбільше, тому крива  $F_{1s-2p}$  досягає максимуму. Аналогічно пояснюється поведінка кривих на рис. 5,б.

Залежність сили осцилятора квантових переходів

від товщини бар'єра наведена на рис. 6. Сили осциляторів  $F_{1s-2p}$  та  $F_{1s-2p}^0$  при збільшенні товщини бар'єра монотонно зростають, а  $F_{1s-1p}$ ,  $F_{1s-1p}^0$  – спадають, оскільки покращується перекриття хвильових функцій 1s та 2p станів електрона і погіршується 1s та 1p станів. Вплив домішки проявляється в підсиленні сили осцилятора 1s-2p і послабленні 1s-1p квантових переходів.

## Висновки

У роботі виконано теоретичне дослідження залежностей енергій та хвильових функцій електрона в s- та p-станах від розмірів шарів наносистеми у випадку наявності або відсутності донорної домішки. Зміна геометричних параметрів приводить до зміни локалізації електрона в наносистемі. Вплив центральної домішки більший на стани електрона, в яких він локалізований в ядрі багаточислової квантової точки.

Досліджено вплив домішки на сили осциляторів внутрішньозонних переходів електронів з основного (1s) стану в збуджені 1p та 2p стани. Показано, що залежності сил осциляторів квантових переходів від розмірів потенціальних ям наносистеми мають немонотонний характер, що пояснюється зміною локалізації електрона в наносистемі. Наявність домішки впливає на положення та величини максимальних та мінімальних значень відповідних залежностей.

**Головацький В.А.** – доктор фізико-математичних наук, професор кафедри теоретичної фізики;  
**Бернік І.Б.** – аспірант кафедри теоретичної фізики..

- [1] U. Resch-Genger, M. Grabolle, S. Cavaliere-Jaricot, R. Nitschke, T. Nann. Nature Methods 5(9), 763 (2008).
- [2] K.E. Sapsford, T. Pons, I.L. Medintz, H. Mattoussi. Sensors 6(8), 925 (2006).
- [3] X. Wang, X. Yan, W. Li, K. Sun. Advanced Materials 24(20), 2742 (2012).
- [4] M.V. Tkach, V.A. Golovac'kij, Ja.M. Berezovs'kij. Physics and Chemistry of Solid State 4(2), 213 (2003).
- [5] N.V. Tkach, V.A. Golovackij, I.B. Frankiv. Nanosistemi, nanomateriali, nanotehnologii. 9(4), 783 (2011).
- [6] V. Holovatsky, O. Makhanets, O. Voitsekhivska. Physica, E 41(8), 1522 (2009).
- [7] V.I. Bojchuk, Ja.R. Leshko, I.V. Bilins'kij, L.M. Turjans'ka. Chemistry of Solid State 13(2), 319 (2012).
- [8] M.V. Tkach, O.M. Vojcehiv'ska, V.A. Golovac'kij, O.M. Mahanec', A.M. Grishhuk. Zhurnal fizichnih doslidzhen' 10(4), 315 (2006).
- [9] V.I. Bojchuk, I.V. Bilins'kij, Ja.R. Leshko. Chemistry of Solid State 11(4), 935 (2010).
- [10] H. Tas, M. Sahin. Journal of Applied Physics 111(8), 083702-1 (2012).
- [11] I.F.I. Mikhail, S.B.A. El Sayed. Physica, E 43(7), 1371 (2011).
- [12] H. Tas, M. Sahin. Journal of Applied Physics 112(5), 053717-1 (2012).

V. Holovatsky, I. Bernik

## **Oscillator Strengths of Intraband Transitions in Spherical Quantum Dot GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As with Central Donor Impurity**

*Chernivtsi National University, Chernivtsi, Kotsubynsky str., 2, 58012, tel. 80372244816, e-mail: [ktf@chnu.edu.ua](mailto:ktf@chnu.edu.ua)*

The distribution of electron densities in multilayered quantum dot GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/ GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As with central hydrogen-like impurity is calculated using energies and wave functions of the electron in the nanosystem obtained in the approximation of effective masses and rectangular potential barriers. It is also investigated the influence of the impurity on oscillator strengths of intraband transitions.

The dependencies of 1s-1p and 1s-2p quantum transitions are obtained as functions of geometrical parameters of the QD. It is shown that the oscillator strengths of different quantum transition can reach a maximum values in their own ranges of nanosystem sizes. The presence of donor impurity essentially affects the distribution of electron densities in nanosystem and oscillator strengthes of quantum transitions.

**Keywords:** multilayered quantum dot, donor impurity, intraband transitions, oscillator strength.