

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
КРИВОРІЗЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ПЕДАГОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ  
КАФЕДРА ФІЗИКИ ТА МЕТОДИКИ ЇЇ НАВЧАННЯ**

«Допущено до захисту»

Завідувач кафедри

\_\_\_\_\_

(підпис) (прізвище, ініціали)

«\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

Реєстраційний № \_\_\_\_\_

«\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

**МЕТОДИЧНІ ОСОБЛИВОСТІ ВИВЧЕННЯ ЕКСИТОННИХ  
СТАНІВ У КРЕМНІЄВИХ КВАНТОВИХ ТОЧКАХ**

Кваліфікаційна робота студента групи ФМм-22  
ступінь вищої освіти магістр

Спеціальності 014.08 Середня освіта (Фізика)

**Любініна Олександра Йосиповича**

Керівник:

доктор фізико-математичних наук, професор  
кафедри фізики та методики її навчання

**Білинський Ігор Васильович**

Оцінка:

Національна шкала \_\_\_\_\_

Шкала ECTS \_\_ Кількість балів \_\_

Голова ЕК \_\_\_\_\_

(підпис) (прізвище, ініціали)

Члени ЕК \_\_\_\_\_

(підпис) (прізвище, ініціали)

\_\_\_\_\_

(підпис) (прізвище, ініціали)

\_\_\_\_\_

(підпис) (прізвище, ініціали)

\_\_\_\_\_

(підпис) (прізвище, ініціали)

## **ЗАПЕВНЕННЯ**

Я, Любінін Олександр Йосипович, розумію і підтримую політику Криворізького державного педагогічного університету з академічної доброчесності. Запевняю, що ця кваліфікаційна робота виконана самостійно, не містить академічного плагіату, фабрикації, фальсифікації. Я не надавав і не одержував недозволену допомогу під час підготовки цієї роботи. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають покликання на відповідне джерело.

Із чинним Положенням про запобігання та виявлення академічного плагіату в роботах здобувачів вищої освіти Криворізького державного педагогічного університету ознайомлений. Чітко усвідомлюю, що в разі виявлення у кваліфікаційній роботі порушення академічної доброчесності робота не допускається до захисту або оцінюється незадовільно.

## ЗМІСТ

<b>ВСТУП</b> .....	4
<b>РОЗДІЛ 1 ФУНДАМЕНТАЛЬНІ АСПЕКТИ ЕКСИТОНІВ У КРЕМНІЄВИХ КВАНТОВИХ ТОЧКАХ</b> .....	7
1.1 Дослідження електронних і домішкових донорних станів в нанокристалах.....	7
1.2 Опис теоретичних моделей для аналізу екситонів у кремнієвих квантових точках.....	13
Висновки до розділу 1 .....	17
<b>РОЗДІЛ 2 ОДНОЧАСТИНКОВІ СТАНИ У КВАНТОВИХ ТОЧКАХ</b> .....	18
2.1 Електронні стани.....	18
2.2 Діркові стани .....	25
Висновки до розділу 2 .....	32
<b>РОЗДІЛ 3 ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ЕКСИТОНУ У КРЕМНІЄВІЙ КВАНТОВІЙ ТОЧЦІ</b> .....	33
3.1 Постановка та розв’язання задачі.....	33
3.2 Аналіз результатів.....	37
Висновки до розділу 3 .....	40
<b>РОЗДІЛ 4 НАВЧАЛЬНІ ТА МЕТОДИЧНІ ПРАКТИКИ В КОНТЕКСТІ ВИВЧЕННЯ ЕКСИТОНІВ</b> .....	41
4.1 Вивчення екситонних станів як частини навчальних курсів з фізики. ....	41
4.2 Практичне використання знань про екситони у кремнієвих квантових точках у вищих навчальних закладах та школах. ....	45
Висновки до розділу 4 .....	49
<b>ВИСНОВКИ</b> .....	50
<b>СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ</b> .....	51
<b>ДОДАТОК А</b> .....	56
<b>ДОДАТОК Б</b> .....	57

## ВСТУП

Вже тривалий час низькорозмірні гетеросистеми формують перспективну галузь досліджень у фізиці твердого тіла [1-6]. Вивчення властивостей низькорозмірних структур важливе для дальшого розвитку електроніки та для удосконалення напівпровідникових приладів. За сучасних умов відбувається поступова трансформація мікроелектроніки у наноелектроніку.

Актуальним завданням сучасних нанотехнологій є пошук нових матеріалів, що можна використати в наноелектроніці. Найбільш плідним шляхом на цьому напрямку є застосування різних нанооб'єктів – таких як квантові точки (КТ), квантові дроти, квантові ями та їх поєднання. КТ заслуговують на особливу увагу, бо вони мають такі властивості, як штучні атоми. Йдеться про такі системи, всі три виміри яких – нанорозміри, тобто розміри, які співрозмірні з довжиною хвилі де Бройля для електрона. Внаслідок цього рух носіїв струму у цих структурах квантується. Це веде до того, що у КТ змінюються всі фізичні властивості порівняно з масивними кристалами. Зокрема, використання масивних монокристалів кремнію в оптоелектронних приладах нашоухується на труднощі, внаслідок непрямозонності цих кристалів. Натомість експериментально виявлено здатність нанокристалів кремнію випромінювати інтенсивне світло, що відкриває перспективу використання нанокристалів кремнію не лише в електричних схемах, але і в оптоелектроніці.

Центральною характеристикою нанооб'єктів є одночастинкові стани, які і визначають різні властивості КТ, зокрема і оптичні. Застосування теорії Латтінджера [7] дає можливість одержати рівняння для огинаючих хвильових функцій. Якщо енергетична зона в точці  $\vec{k} = 0$  не вироджена, то в квадратичному по хвильовому вектору наближенні у сферично-симетричному полі  $\Pi(r)$  можна отримати хвильове рівняння Шредінгера

для частинки з ефективною масою  $m^*$ . Зважаючи на те, що зона провідності більшості напівпровідників задовольняє вищевказаним умовам, це рівняння було покладено в основу при визначенні електронних та донорних станів у квантових точках. Щодо валентної зони, то можна користуватися тим же рівнянням для визначення і діркових, і акцепторних станів. Однак таке припущення є досить грубим. Тому для глибшого розуміння та кращого співпадання експериментальних даних з результатами обчислень необхідно використовувати багатозонні моделі валентної зони, які б враховували зону важких та легких дірок, спин відщеплену зону та їх взаємодію. Тому можна підсумувати.

Кремнієві квантові точки є перспективними структурами для створення нових матеріалів та технологій у сфері фотоніки, оптоелектроніки та квантової обчислювальної техніки.

Розуміння та контроль екситонних станів у кремнієвих квантових точках може сприяти розробці більш ефективних способів використання сонячної енергії та створення високоефективних світлодіодів.

Вивчення екситонів у кремнієвих квантових точках відкриває нові перспективи для розвитку квантових обчислень, забезпечуючи тим самим майбутнє для квантових технологій та обчислювань.

Використання кремнієвих квантових точок може сприяти розвитку екологічно чистих технологій, зокрема, в області енергозбереження та виробництва ефективних джерел світла.

Дослідження екситонних станів у кремнієвих квантових точках є актуальним та важливим для подальшого наукового та технологічного прогресу, спрямованого на створення більш стабільних та продуктивних технологій для майбутнього.

Саме тому **метою** цієї магістерської роботи є визначення екситонних станів у сферичних КТ з врахуванням багатозонних моделей валентної зони та їх особливостей у випадку кремнієвих КТ.

Щоб досягнути цієї мети, треба було вирішити наступні **завдання**:

- визначити одноелектронні стани сферичної квантової точки;
- отримати точні розв'язки рівняння Шредінгера і хвильові функції у сферичних нанокристалах напівпровідників з врахуванням простої та складної структури валентної зони;
- побудувати хвильову функцію екситона та обчислити екситонний спектр квантової точки;
- провести чисельні розрахунки енергетичних спектрів;
- дослідити відмінність енергетичного спектру при зміні радіуса КТ та вибору моделі валентної зони.

**Об'єктом дослідження** є наногетеросистема  $Si/SiO_2$ .

**Предметом дослідження** у даній роботі є енергетичні спектри електронів, дірок, екситонів у сферичній  $Si/SiO_2$  КТ та теоретичні аспекти, властивості та методи аналізу екситонних станів у кремнієвих квантових точках, а також їх застосування в оптоелектроніці та квантовій фізиці.

# РОЗДІЛ 1 ФУНДАМЕНТАЛЬНІ АСПЕКТИ ЕКСИТОНІВ У КРЕМНІЄВИХ КВАНТОВИХ ТОЧКАХ

## 1.1 Дослідження електронних і домішкових донорних станів в нанокристалах

Квазінульвимірні структури, які ще називають квантовими точками, почали досліджувати у середині 80-х років. У таких об'єктах заряди обмежені у всіх трьох напрямках, і тому вони мають дискретний спектр.

Вперше були описані напівпровідникові квантові точки на основі нанокристалів сполук  $A^{II}B^{VI}$ , що дисперговані у скляній матриці. Варто зауважити, що в таких структурах якість гетерограниці між склом і КТ була невисока. Це сприяло накладанню певних обмежень на можливість правильної інтерпретації результатів експериментальних вимірювань.

Для створення напівпровідникових структур з квантовими точками використовуються прямі та непрямі методи. До першого відносяться ріст у V-канавках та на гофрованих поверхнях, метод електронно-променевої епітаксії. Крім того ще використовують явища самоорганізації на кристалічних поверхнях. Такий підхід є найкращим і має найбільші перспективи у формуванні впорядкованих КТ. До другого — виготовлення КТ шляхом їх поперечного витравлювання із структур з квантовими ямами. Його недоліком є недостатня роздільна здатність та можливість пошкодження гетерограниць у процесі травлення.

Квантові точки, що розглядаються в даний час, широко вивчалися вже давно. Оскільки припускалось, що вони мають ідеальну структуру, то виходячи з того можна їх використовувати в оптично-електронних схемах і лазерних системах. Також передбачено великі зміни у оптичному поглинанні та показнику заломлення в оптичних властивостях квантово-точкових структур.

Кремній є основним матеріалом для мікроелектроніки, але його використання в оптоелектронних пристроях наштовхується на труднощі через його фундаментальний недолік – його непрямозонність. Подолання цього фундаментального недоліку є привабливим, оскільки відкриває можливості для інтегрування електронних і оптичних приборів на основі кремнію. Один з можливих варіантів – використання нанокристалічного кремнія. При цьому нанокристали можуть самі бути джерелами випромінювання [8] в силу нехтування закону збереження квазіімпульса при оптичних переходах через порушення трансляційної симетрії [9,10]. Крім того, використання кремнієвих нанокристалів як фоточутливих каталізаторів електронних переходів в молекулах має самостійне значення для застосувань в хімії і біології [11].

Для розуміння фізичних процесів з участю електронів і дірок, зв'язаних в нанокристалах, важливо знати їхній енергетичний спектр і хвильові функції.

На даний момент існує велика кількість теоретичних робіт, в яких розглядалися стани електронно-діркових пар (екситонів) в нанокристалах кремнію: за допомогою метода псевдопотенціала [12-14], метода локальної густини [15-17], наближення сильного зв'язку [18-23], наближення ефективної маси [22,24-29] і інших [30,31].

В ряді робіт по опису електрон-діркових станів в нанокристалах [24,26,27], виконаних в наближенні ефективної маси, використовувався дуже спрощений опис структури вершини валентної зони  $Si$ . «Багатозонне» наближення ефективної маси (кр-метод), враховуючи виродження валентної зони  $Si$ , вперше було застосовано в [25]. Але автори розглядали граничний випадок сильної спін-орбітальної взаємодії [32], що не виправдано для  $Si$ , в якому енергія спін-орбітального розчеплення 0.04 eV. В роботі [28] спектр електронів і дірок без врахування кулонівської взаємодії розглядався в «багатозонному» наближенні ефективної маси, враховуючи складну



структуру вершини валентної зони кремнію в межах слабкої спіно-орбітальної взаємодії. Але ефекти змішування зон враховувалися по теорії збурень. При цьому нехтувалась анізотропія спектра дірок [28,33]. Для розрахунку енергетичного спектру електронів використовувався гамільтоніан з робіт [34,35], який враховував, що мінімум зони провідності лежить поблизу точки  $X$ , де мають місце ефекти перемішування двох зон. В якості нульового наближення використовувалося просте наближення ефективної маси, а анізотропія і ефекти перемішування двох нижніх зон провідності враховувалися по теорії збурень.

Більшість теоретичних робіт стосується електронних і домішкових донорних станів. Зважаючи на те, що зону провідності можна описати параболічним законом дисперсії, було одержано рівняння Шредінгера з використанням методу ефективної маси. Аналогічно можна розглядати діркові та акцепторні стани. Однак у більшості розглядуваних напівпровідників структура валентної зони є складною і виродженою у центрі зони Бріллюена, тому опис діркових станів без врахування складної структури валентної зони не можна вважати задовільним.

Одними з перших робіт, де враховано виродження енергетичних зон, були роботи Латтінджера [7]. Авторами одержано рівняння для частинок, що рухаються у збурених періодичних полях. Шляхом математичних перетворень отримано відповідні рівняння, що описують квазічастинки у випадках невірджених і вироджених зон. Проаналізовано вплив зовнішнього магнітного поля і спіно-орбітальної взаємодії у напівпровідниках. Використовуючи одержані рівняння і теорію груп з вибраним базисом представлення  $\Gamma'_{25}$  для кубічних кристалів, отримано матрицю  $\mathbf{D}$ , що у випадку вироджених зон відіграє таку саму роль, як і ефективна маса для простих зон. Ця матриця отримана як з врахуванням спіну для базових функцій, так і з його відсутністю.

Невиродженою прийнято вважати енергетичну зону, що значно віддалена від інших і має поблизу екстремальної точки лише двократне виродження по спіну. Саме така фізична ситуація має місце для зони провідності у напівпровідниках  $Ge, Si, A^{III}B^V$ . Тому зважаючи на це, для електронів у зоні провідності широкозонних напівпровідників, використовуючи формалізм Латтінджера, одержано прості одноелектронні рівняння Шредінгера з ефективними масами у зовнішніх потенціальних полях. А для обчислень діркових станів найчастіше використовують інші зонні моделі. Для повного опису необхідно враховувати чотири зони: зону провідності, зони важких та легких дірок, спин-відщеплену зону. Всі ці зони, як зазначено вище, двічі вироджені ще по спіну. Тому матриця  $\mathbf{D}$  буде мати розмірність  $8 \times 8$ . Однак за певних фізичних обставин можна спростувати вигляд матриці  $\mathbf{D}$ , тобто зменшувати її розмірність. Вибравши потрібним чином лінійні комбінації з базових функцій, можна отримати компактний запис матриць  $\mathbf{D}$ , якщо дірці приписати спин, що пов'язаний з орбітальним розщепленням атомних рівнів, які утворюють валентну зону. Нехтуючи гофрованістю ізоенергетичних поверхонь, отримано компактний вигляд матриць  $\mathbf{D}$  і гамільтоніана системи. Дірці можна приписати спин  $\vec{J}$ , оператор якого входить в гамільтоніан. Крім того ще наявний «макроскопічний» орбітальний рух, що описується методом ефективної маси, тому доцільно ввести повний момент імпульсу  $\vec{F} = \vec{J} + \vec{L}$ , який комутує з гамільтоніаном. Загальні розв'язки рівнянь з матричним гамільтоніаном були представлені у вигляді лінійної комбінації добутків радіальної функції та власних значень оператора квадрату повного моменту імпульсу  $F^2$ . Саме використання такої ідеології і дозволило застосувати теорію моменту імпульсу для отримання радіальних рівнянь для домішок у масивних кристалах. Взявши до уваги зони легких та важких дірок, у роботі [34] одержано чотиризонний гамільтоніан і описано загальну схему виводу радіальних рівнянь. Авторами введено відношення ефективних мас легкої та важкої дірки  $\beta = m_l / m_h$  і безрозмірну енергію, яка включала в себе діелектричну проникність

кристала. Ці рівняння для дірки акцепторної домішки у масивних кристалах розв'язані чисельними методами. Безрозмірну енергію отримано як функцію відношення ефективних мас. А в роботі [35] розглянуто два випадки: сильну та слабку спін-орбітальну взаємодію. У випадку сильної спін-орбітальної взаємодії величина  $\Delta_{so}$  велика, тому для опису дірки використовують зони легких та важких дірок, що еквівалентно матричному гамільтоніану розмірністю  $4 \times 4$  і спіну дірки  $j = 3/2$ , а спін-відщеплену зону відкидають. Якщо спін-орбітальна взаємодія слабка, то можна вважати, що  $\Delta_{so} \rightarrow 0$ . У такому випадку можна отримати тризонний гамільтоніан, а для компактного запису гамільтоніана приписати дірці спін  $j = 1$ . Енергію акцепторної домішки було визначено варіаційним методом. Отримані результати було порівняно з відповідними експериментальними значеннями енергій домішок у конкретних масивних кристалах, що дозволило встановити задовільну кількісну збіжність даних.

Однією з перших робіт, де застосовано багатозонний гамільтоніан  $6 \times 6$  для обчислення діркових станів у сферичних мікрочастинках  $CdS$  з нескінченним потенціалом на межі поділу середовищ, є робота [4]. Тут представлено радіальні рівняння для парних та непарних станів, отримано загальні розв'язки радіальних рівнянь за допомогою сферичних функцій Бесселя першого роду. На основі виведених дисперсійних рівнянь визначено залежність енергії дірки від розмірів кристала.

У кубічних напівпровідникових кристалах, де параметр  $\beta$  є малим, можна знехтувати всіма зонами і в обчислення включити лише зону важких дірок. Для кристалів з великим відношенням мас дірок можна використовувати граничний випадок, коли маса легкої дірки  $m_l \rightarrow 0$ .

Застосування радіальних рівнянь для чотиризонної моделі дозволило далі обчислювати екситонні стани, аналізувати вплив електричного поля на розщеплення енергетичних рівнів [35]. У цій роботі компактно записано радіальні рівняння у матричній формі для парних і непарних станів, введено

співвідношення між коефіцієнтами у рівняннях, які виражено через  $6-j$  символи. Для нескінченної моделі розриву зон одержано розв'язки радіальних рівнянь і обчислено енергетичні спектри дірок. Розкладаючи хвильову функцію екситона по базису, що утворений добутком хвильових функцій станів електрона і дірки, одержано систему рівнянь, з якої визначено енергію екситона. А енергетичні рівні дірки у зовнішньому електричному полі знайдено шляхом діагоналізації гамільтоніана дірки в електричному полі. Також одержано аналітичний вираз для матричних елементів доданку з електричним полем. Показано, що збільшення електричного поля приводить до зростання розщеплення між рівнями (ефект Штарка).

Отже, з короткого огляду вищезгаданих робіт, бачимо, що вивчалися різні властивості напівпровідникових наноструктур. Але у цих роботах недостатню увагу приділено вивченню залежності енергетичних рівнів екситона від розмірів квантової точки, порівняння спектру екситона в одно та багатозонних моделях, встановлення меж застосування теорії одно- та багатозонної теорії для кремнієвих КТ. Тому, враховуючи вищесказане, у цій роботі досліджені ці питання.

## **1.2 Опис теоретичних моделей для аналізу екситонів у кремнієвих квантових точках**

Використання різних моделей залежить від конкретних наукових досліджень, їхньої спрямованості та обраної стратегії аналізу екситонів у кремнієвих квантових точках для отримання найточніших та повних результатів. Комбінування цих моделей може допомогти отримати більш комплексне розуміння процесів у квантових точках. Це дозволить проводити аналіз властивостей екситонів. Різні моделі дозволяють отримувати характеристики та властивості екситонів, такі як енергія, спектральні характеристики, ефективність випромінювання тощо. Це допомагає краще зрозуміти поведінку екситонів та їх вплив на фізичні властивості матеріалу. Воно буде сприяти розробці нових матеріалів та технологій. Аналіз екситонів у кремнієвих квантових точках дозволяє працювати над розробкою нових матеріалів та технологій, таких як фотодетектори, світлодіоди, сонячні елементи тощо, що базуються на властивостях екситонів. Застосування різних моделей дозволяє оптимізувати параметри квантових пристроїв, виходячи з властивостей екситонів. Це сприяє створенню більш ефективних та продуктивних квантових пристроїв. Дослідження екситонів дозволяє отримати глибше розуміння фундаментальних процесів, які відбуваються у кремнієвих квантових точках, від рівнів енергії до процесів рекомбінації та випромінювання.

Отже, використання різних моделей дає можливість наблизитися до повного та глибшого розуміння екситонів у кремнієвих квантових точках та використовувати ці знання для створення нових технологій та матеріалів з певними властивостями.

Зупинимося на більш детальному описі існуючих моделей.

Модель масштабного квантового опису є математичною та фізичною моделлю, яка дозволяє аналізувати квантові ефекти, що виникають в

кремнієвих квантових точках залежно від їхнього розміру та форми. Основна ідея полягає у тому, що властивості квантових точок можна описати через масштабування параметрів системи відносно їхнього розміру.

Ключові аспекти цієї моделі включають:

Розмірні квантові ефекти: При зменшенні розмірів кремнієвої квантової точки до нанометрового масштабу виникають квантові ефекти, такі як квантування енергетичних рівнів та обмеження руху носіїв заряду.

Ефект конфайнменту: Модель враховує конфайнмент заряджених частинок всередині кремнієвої квантової точки, де обмеження просторового руху впливає на їхні енергетичні рівні.

Розмірна залежність енергетичних рівнів: Енергетичні рівні в квантових точках залежать від їхнього розміру та форми. Модель описує, як ці рівні змінюються зі зменшенням розміру квантової точки.

Ефект розсіяння: Масштабування параметрів враховує ефекти розсіяння та взаємодіючих процесів у кремнієвих квантових точках.

Модель масштабного квантового опису є ключовим інструментом для аналізу та розуміння квантових явищ у кремнієвих квантових точках. Ця модель є особливо корисною при проектуванні та оптимізації квантових пристроїв на основі таких структур.

Модель збудженого електрона-діркової пари є теоретичною концепцією, яка описує утворення та властивості екситонів у напівпровідникових квантових структурах, зокрема в кремнієвих квантових точках. Основна ідея полягає у створенні та аналізі електронно-діркових пар, які утворюють екситони.

Ключові аспекти цієї моделі включають:

Створення електронно-діркової пари: У напівпровідниковій квантовій точці внаслідок фотонного збудження або інших процесів може виникнути електронно-діркова пара.

Формування екситона: Електрон та дірка можуть утворити зв'язану систему, відому як екситон. Важливою характеристикою є залежність

параметрів екситона від параметрів квантової точки та властивостей носіїв заряду.

Розгляд взаємодії та властивостей екситона: Модель дозволяє аналізувати взаємодію електрона та дірки, що утворюють екситон, та вивчати її вплив на енергетичні та оптичні властивості екситонів.

Ефекти кулонівської взаємодії: Кулонівська взаємодія між електроном та діркою є ключовою складовою утворення екситона. Модель враховує цю взаємодію та її вплив на енергетику та структуру екситону.

Ця модель є важливим інструментом для аналізу процесів утворення та властивостей екситонів у кремнієвих квантових точках, що є актуальним для розуміння та розробки квантових пристроїв та технологій.

Теоретична модель, яка використовується в магістерській роботі це модель Кона-Латтінжера.

Модель Кона-Латтінжера (Kohn-Luttinger model) є теоретичною концепцією, що описує властивості електронів у напівпровідникових кристалах, зокрема у твердотільних кристалах зі складною зонною структурою, наприклад, у складних напівпровідниках.

Основні аспекти моделі включають:

Масштабування зон: Модель розглядає зони електронної та діркової провідності та їхні ефективні маси, що можуть бути відмінними від мас електрону та дірки в вільному електронному газі.

Урахування спіно-орбітальної взаємодії: Модель враховує вплив спіно-орбітальної взаємодії на енергії та структуру зон, особливо у системах зі складними атомними або молекулярними спіновими структурами.

Зонна структура та енергетичні рівні: Модель аналізує енергетичну структуру, зокрема властивості та особливості енергетичних зон у вузьких зонах, що є характерними для складних напівпровідників.

Взаємодія електронів та дірок: Модель описує взаємодію електронів та дірок у складних структурах та її вплив на енергетичні рівні та перенос електричного заряду.

Модель Кона-Латтінжера є важливим інструментом для розуміння та аналізу властивостей електронів у складних напівпровідниках та інших складних кристалах. Вона є важливою для розробки та оптимізації матеріалів та пристроїв у сфері напівпровідникових технологій.

Модель вільних носіїв заряду: Ця модель базується на аналізі руху та взаємодії вільних носіїв заряду (електронів та дірок) у кремнієвій квантовій точці. Вона дозволяє прогнозувати енергетичні та спектральні властивості екситонів.

Ці теоретичні моделі спрямовані на розуміння утворення та властивостей екситонів у кремнієвих квантових точках, що є важливим для їхнього подальшого використання в різних сферах, включаючи оптоелектроніку, фотоніку та квантові технології.



## Висновки до розділу 1

Екситони утворюються внаслідок зв'язку електрона та дірки, що може бути спричинене фотонним збудженням. Енергетичні рівні екситонів визначаються взаємодією між носіями заряду та конфайнментом у квантовій точці. Розмір та форма квантової точки впливають на енергетику екситонів, що робить їх керуючими параметрами. Врахування взаємодії екситонів з іншими електронами та дірками важливо для аналізу їхньої добротності та стійкості.

Ці аспекти є ключовими для вивчення та подальшого використання екситонів у кремнієвих квантових точках для розробки нових фотонних та квантових пристроїв.

## РОЗДІЛ 2 ОДНОЧАСТИНКОВІ СТАНИ У КВАНТОВИХ ТОЧКАХ

### 2.1. Електронні стани

Розглядається сферична КТ радіусом  $a$  (рис.2.1). Ефективна маса

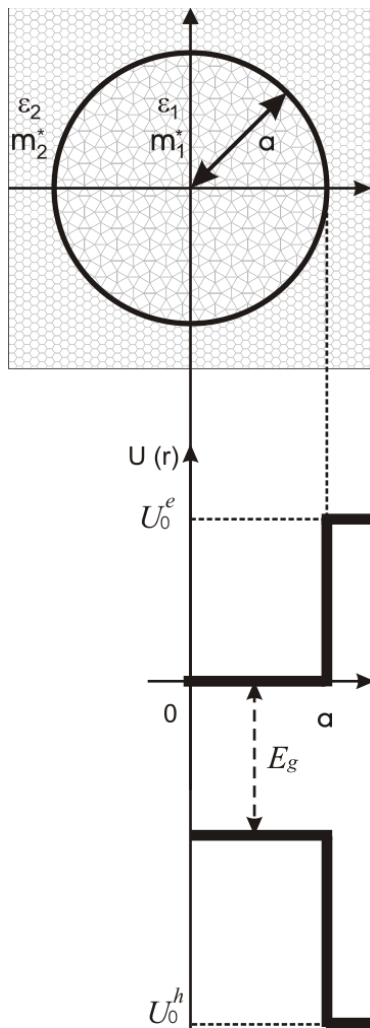


Рис. 2.1. Модель сферичної квантової точки.

електрона в ній  $m_1^*$ , а діелектрична проникність  $\varepsilon_1$ . Ця КТ знаходиться у матриці  $SiO_2$ , яка характеризується ефективною масою електрона в ній  $m_2^*$  та діелектричною проникністю  $\varepsilon_2$ . Оскільки зона провідності у кремнію має декілька екстремумів, що розташовані в еквівалентних точках зони Бріллюена, то поверхня сталої енергії в  $k$ -просторі взагалі-то кажучи не буде сферою. Мінімум зони провідності у кремнію розташований у напрямку  $[100]$  на відстані  $k_z^0 = 0.85(2\pi/a_0)$ , де  $a_0 = 5.43 \text{ \AA}$  – стала ґратки. Таким чином можна ввести дві маси електрона відносно осі:  $m_{\perp} = 0.190$ ,  $m_{\parallel} = 0.916$  (усі параметри гетероструктури подано у додатку). У цій роботі буде використовуватися усереднена за напрямками ефективна маса електрона:

$$\frac{1}{m_1^*} = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{m_{\parallel}} + \frac{2}{m_{\perp}} \right) \quad \rightarrow \quad m_1^* = \frac{3m_{\parallel}m_{\perp}}{2m_{\parallel} + m_{\perp}} = 0.258. \quad (2.1)$$

Для знаходження електронного спектру сферичної КТ необхідно розв'язати рівняння Шредінгера. Гамільтоніан системи запишемо в наближенні ефективної маси:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m^*} \nabla + U(r), \quad (2.2)$$

де  $m^* = m_1^*$ , якщо  $r \leq a$ , і  $m^* = m_2^*$ , якщо  $r > a$ . Потенціальну енергію вибрано у вигляді сферично-симетричної прямокутної потенціальної ями:

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a, \\ U_0^e, & r > a, \end{cases} \quad (2.3)$$

де  $U_0^e$  – величина, що описує розрив зони провідності в гетероструктурі.

Рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (2.2) будемо розв'язувати у сферичній системі координат у двох областях зміни координати  $r$ . Якщо  $r \leq a$ , то відповідне рівняння Шредінгера можна записати у вигляді:

$$\left[ \frac{\hat{p}_r^2}{2m_1^*} + \frac{\hat{L}^2}{2m_1^* r^2} \right] \psi_1(r, \theta, \varphi) = E \psi_1(r, \theta, \varphi), \quad (2.4)$$

де  $\hat{p}_r$  – радіальна складова оператора імпульсу,  $\hat{L}^2$  – оператор моменту імпульсу в квадраті. У сферичній системі координат рівняння (2.4) легко розділяється за змінними  $r$ ,  $\theta$ ,  $\varphi$ , якщо хвильову функцію представити у вигляді добутку  $\psi_1(r, \theta, \varphi) = R_1(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$ . Кутова частина рівняння розв'язується і не залежить від  $U$ :

$$\hat{L}^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1), \quad (2.5)$$

де  $l = 0, 1, 2, \dots$  – орбітальне квантове число. Враховуючи (2.5) і явний вигляд оператора  $\hat{p}_r$ , рівняння (2.4) можна звести до радіального рівняння:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_1^* r^2} \right] R_1(r) = E R_1(r). \quad (2.6)$$

Домножуючи рівняння (2.6) на  $\left(-\frac{2m_1^*}{\hbar^2}\right)$ , одержимо:

$$\frac{d^2}{dr^2} R_1(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} R_1(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} R_1(r) + k^2 R_1(r) = 0, \quad (2.7)$$

де  $k^2 = \frac{2m_1^*}{\hbar^2} E$ . Таке позначення введено з розрахунку на те, що енергія є додатною величиною. Розв'язком цього рівняння є лінійна комбінація сферичних функцій Бесселя:

$$R_1(r) = C_{11} j_l(kr) + C_{12} y_l(kr), \quad (2.8)$$

де  $j_l(kr)$  – сферична функція Бесселя першого роду,  $y_l(kr)$  – сферична функція Бесселя другого роду. Функція  $y_l(kr)$  при  $r \rightarrow 0$  прямує до  $\infty$ . Оскільки квадрат модуля хвильової функції показує розподіл густини ймовірності перебування частинки в заданій точці простору, то очевидно хвильова функція не може перетворюватися в нескінченність. Саме тому у розв'язку (2.8) необхідно покласти, що  $C_{12} = 0$ . Отже, розв'язком радіального рівняння Шредінгера (2.6) в розглядуваній області буде:

$$R_1(r) = C_{11} j_l(kr), \quad (2.9)$$

Якщо  $r > a$ , то відповідне рівняння Шредінгера можна записати у вигляді:

$$\left[ \frac{\hat{p}_r^2}{2m_2^*} + \frac{\hat{L}^2}{2m_2^* r^2} + U_0^e \right] \psi_2(r, \theta, \varphi) = E \psi_2(r, \theta, \varphi). \quad (2.10)$$

Проводячи аналогічні міркування до (2.5)–(2.6), одержимо наступне радіальне рівняння:

$$\left[ \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m_2^*}{\hbar^2} (U_0^e - E) \right] R_2(r) = 0.$$

Оскільки нас цікавлять дискретні стани, то  $E < U_0^e$ . Вводячи позначення

$$\chi^2 = \frac{2m_2^*}{\hbar^2}(U_0^e - E),$$

радіальне рівняння запишеться у вигляді:

$$\frac{d^2}{dr^2}R_2(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr}R_2(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}R_2(r) - \chi^2 R_2(r) = 0. \quad (2.11)$$

Розв'язком рівняння (2.11) є дві модифіковані сферичні функції Бесселя. Одна з них прямує до  $\infty$  при  $r \rightarrow \infty$ , тому коефіцієнт біля неї вибираємо рівним нулю. Отже, розв'язком рівняння (2.11), що задовольняє умови скінченності хвильової функції є модифікована сферична функція Бесселя другого роду:

$$R_2(r) = C_{22}k_l(\chi r). \quad (2.12)$$

Вирази (2.9) та (2.12) описують радіальні складові хвильової функції в двох різних областях. Сама ж хвильова функція має бути неперервна у всій області визначення, а також неперервним має бути потік густини ймовірності. Використовуючи ці дві умови, можна записати граничні умови для радіальних складових (умови «зшивання»):

$$\begin{cases} R_1(r)|_{r=a} = R_2(r)|_{r=a}, \\ \left. \frac{d}{dr}R_1(r) \right|_{r=a} = \left. \frac{d}{dr}R_2(r) \right|_{r=a}. \end{cases} \quad (2.13)$$

Підставляючи (2.9) та (2.12) в (2.13), одержано

$$\begin{cases} C_{11}j_l(ka) = C_{22}k_l(\chi a), \\ C_{11} \frac{k}{m_1^*} j_l'(ka) = C_{22} \frac{\chi}{m_2^*} k_l'(\chi a), \end{cases} \rightarrow \begin{cases} C_{11}j_l(ka) - C_{22}k_l(\chi a) = 0, \\ C_{11} \frac{k}{m_1^*} j_l'(ka) - C_{22} \frac{\chi}{m_2^*} k_l'(\chi a) = 0. \end{cases} \quad (2.14)$$

Тут штрихом позначено похідну від відповідної функції. Система рівнянь (2.14) – лінійна однорідна система рівнянь відносно коефіцієнтів  $C_{11}$ ,  $C_{22}$ . Така система має розв'язок, якщо визначник дорівнює нулю:

$$\left| \begin{array}{cc} j_l(ka) & -k_l(\chi a) \\ \frac{k}{m_1^*} j_l'(ka) & -\frac{\chi}{m_2^*} k_l'(\chi a) \end{array} \right| = 0 \rightarrow \frac{\chi}{m_2^*} k_l'(\chi a) j_l(ka) = \frac{k}{m_1^*} j_l'(ka) k_l(\chi a).$$

Якщо в останньому рівнянні перейти від  $k, \chi$  до енергії (2.7), (2.11), то одержимо трансцендентне рівняння відносно  $E$ :

$$\begin{aligned} & \frac{\sqrt{2m_2^*(U_0^e - E)}}{m_2^*} \cdot k_l' \left( \sqrt{\frac{2m_2^*}{\hbar^2} (U_0^e - E)} a \right) \cdot j_l \left( \sqrt{\frac{2m_1^*}{\hbar^2} E} \cdot a \right) = \\ & = \frac{\sqrt{2m_1^* E}}{m_1^*} \cdot j_l' \left( \sqrt{\frac{2m_1^*}{\hbar^2} E} \cdot a \right) \cdot k_l \left( \sqrt{\frac{2m_2^*}{\hbar^2} (U_0^e - E)} \cdot a \right). \end{aligned} \quad (2.14)$$

Дисперсійне рівняння (2.14) розв'язано чисельно на ПК за допомогою систем комп'ютерної математики для конкретних значень радіуса КТ та орбітального квантового числа.

Обчислення проведено наступним чином. У рівняння (2.14) підставляємо конкретне значення орбітального квантового числа  $l$ . При фіксованому  $l$  рівняння може мати скінченне число коренів або взагалі не мати жодного. Коли наявні розв'язки, то їх нумеруватимемо числом  $n$ . Результати обчислень подано на рис.2.2.

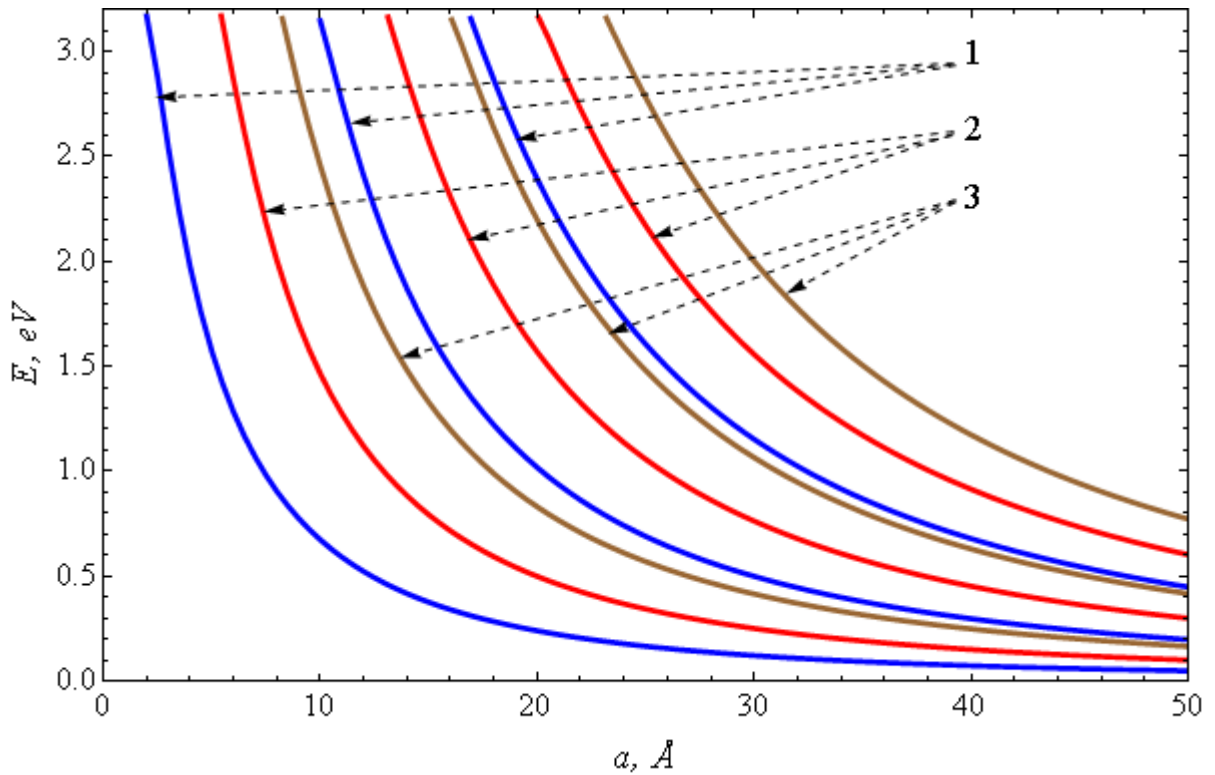


Рис. 2.2. Залежність енергії електрона у сферичній КТ від її радіуса. 1 – енергія S-станів, 2 – енергія P-станів, 3 – енергія D-станів.

Конкретні обчислення проведено для трьох значень квантового числа  $l=0,1,2$ . При кожному значенні  $l$  максимальне число коренів, які знаходилися, вибирали рівним трьом (хоча для великих радіусів їх значно більше). Енергетичні рівні пронумеровано за допомогою позначень  $nX$ , де  $n$  позначає номер розв'язку дисперсійного рівняння (2.14) при фіксованому орбітальному квантовому числі, а  $X$  приймає значення (S, P, D) для  $l=0, 1, 2$  відповідно. З рисунка видно, що зменшення радіуса КТ веде до зростання енергії електрона. Зростання енергії зумовлено збільшенням кінетичної енергії. Останнє є причиною зростання імпульсу. Згідно принципу невизначеностей Гайзенберга  $\Delta p \Delta x \geq \hbar$ . Отже, зменшення лінійного розміру  $\Delta x$  (а в нас  $a$ ) веде до збільшення імпульсу, який входить у вираз кінетичної енергії. Таким чином повна енергія електрона зростає до величини  $U_0^e = 3.2 eV$ . Вище цього значення дискретних станів не існує.

Кожен енергетичний рівень має таке значення радіуса КТ, при якому він переходить в неперервний енергетичний спектр. При  $a = 1\text{Å}$  у кремнієвій КТ не існує жодного дискретного стану. Однак при таких розмірах говорити про наявність КТ не можна. Крім того, оскільки застосовується метод ефективної маси, то практично результати, що одержані при радіусах  $a < 10\text{Å}$  не мають фізичного змісту, а є лише математичним результатом застосованої моделі. Отже, реально отримані результати мають зміст при  $a > 10\text{Å}$ , тоді можна говорити про енергію дискретних рівнів у сферичній КТ.

Отже, у цьому параграфі визначено енергії електронних станів у сферичній КТ, показано, що збільшення радіуса КТ веде до пониження енергії електрона. Досліджено умови появи дискретних енергетичних станів у залежності від радіуса КТ. Ці результати буде використано для побудови хвильової функції екситона при обчисленні екситонних станів у кремнієвій КТ.



## 2.2. Діркові стани

Для знаходження діркових станів у сферичній квантовій точці можна скористатися таким же підходом, як в попередньому параграфі, лише замість ефективних мас електрона брати ефективні маси дірки, а замість  $U_0^e \rightarrow U_0^h$ . Однак такий підхід неповністю відобразить реальну ситуацію. У кремнію валентна зона масивного кристалу має вигляд (рис.2.3).

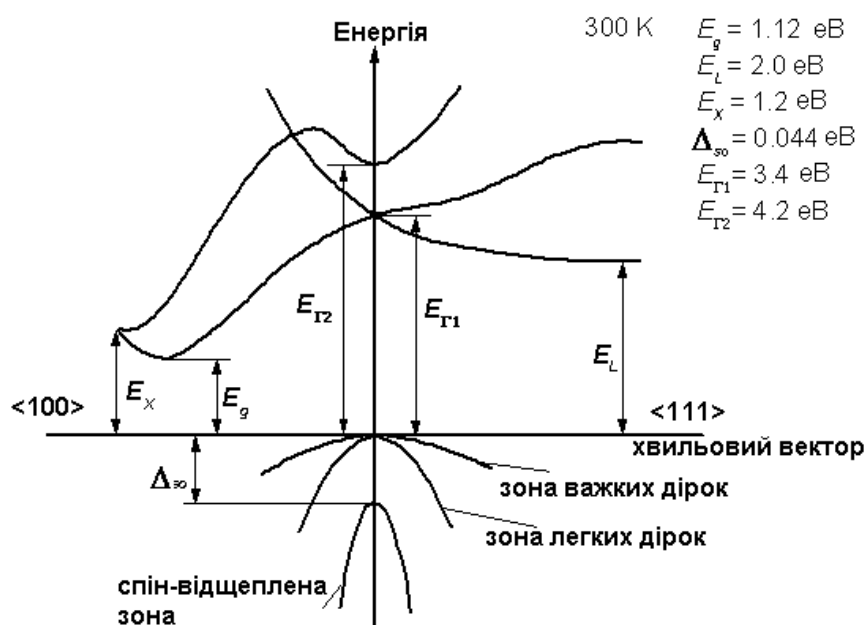


Рис. 2.3. Структура енергетичних зон у масивному кристалі кремнію.

З рисунка видно, що для обчислення діркових станів необхідно враховувати зону важких та легких дірок, а також спін-відщеплену зону. Оскільки зона провідності знаходиться досить далеко, то її впливом нехтуємо. В такому випадку для обчислень треба використовувати 6-зонну модель валентної зони (є три зони і дві орієнтації спіну). Однак спін-відщеплена зона знаходиться дуже близько ( $\Delta_{so} = 0.04 \text{ \AA}$ ) до вершини валентної зони, тому можна знехтувати спін-орбітальною взаємодією та покласти, що  $\Delta_{so} \rightarrow 0$ . В

такому випадку маємо тризонну модель валентної зони. Цю модель застосуємо для кремнієвої КТ.

Тризонний сферичний гамільтоніан Латгінджера прийме вигляд [39]:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\gamma_1 + 4\gamma) \hat{p}^2 - 3\gamma \left( \vec{\hat{p}} \vec{\hat{J}} \right)^2 + U(r), \quad (2.15)$$

де  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma = 1/5(3\gamma_3 + 2\gamma_2)$  – параметри Латгінджера, через які можна визначити ефективні маси легкої та важкої дірок,  $\vec{\hat{J}} = \vec{i}\hat{J}_x + \vec{j}\hat{J}_y + \vec{k}\hat{J}_z$  – оператор спінового моменту  $j = 1$ :

$$\hat{J}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

а потенціальна енергія визначається формулою (2.3), в якій потрібно замінити  $U_0^e \rightarrow U_0^h$ . У (2.15) враховано, що відлік енергії направлено «вниз».

У роботах [37-39] показано, що існують три типи станів:

$$(2.16) \quad \begin{cases} \psi_{f,M}^{f-1,f+1}(r,\theta,\varphi) = R_f^{f-1}(r)\Phi_{f,M}^{f-1}(\theta,\varphi) + R_f^{f+1}(r)\Phi_{f,M}^{f+1}(\theta,\varphi), & f \geq 1; \quad l = f-1, f+1; \\ \psi_{f,M}^f(r,\theta,\varphi) = R_f^f(r)\Phi_{f,M}^f(\theta,\varphi), & f \geq 1; \quad l = f; \\ \psi_{0,0}^1(r,\theta,\varphi) = R_0^1(r)\Phi_{0,0}^1(\theta,\varphi), & f = 0; \quad l = 1, \end{cases}$$

де введено спінори, що відповідають спіну  $j = 1$ :

$$\Phi_{f,M}^l(\theta,\varphi) = \sum_{m=-l}^l \sum_{m_j=-j}^j C_{l,m;j,m_j}^{f,M} Y_{l,m}(\theta,\varphi) \chi_{m_j}, \quad (2.17)$$

$\hbar^2 f(f+1)$ ,  $\hbar^2 l(l+1)$ ,  $\hbar M$ ,  $\hbar m$ ,  $\hbar m_j$  у вибраній системі одиниць є власними значеннями операторів повного моменту імпульсу в квадраті  $\hat{F}^2$ , орбітального моменту імпульсу в квадраті  $\hat{L}^2$ , проекції повного моменту імпульсу  $\hat{F}_z$ , проекції орбітального моменту імпульсу  $\hat{L}_z$ , проекції спінового

моменту дірки  $\hat{J}_z$  відповідно,  $\chi_{m_j}$  – трикомпонентні спінові функції,  $Y_{l,m}$  – сферичні гармоніки, які є власними функціями оператора  $\hat{L}^2$ . Тут також використано коефіцієнти Клебша-Жордана  $C_{l,m;j,m_j}^{f,M}$  як в [40].

Для цих трьох типів станів існують радіальні рівняння [37]:

$$-\frac{\gamma_1 \hbar^2}{2} \begin{pmatrix} C_1 \hat{B}_{f-2}^+ \hat{B}_{f-1}^- & C_2 \hat{B}_f^- \hat{B}_{f+1}^- \\ C_2 \hat{B}_f^+ \hat{B}_{f-1}^+ & C_3 \hat{B}_{f+2}^- \hat{B}_{f+1}^+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_f^{f-1} \\ R_f^{f+1} \end{pmatrix} + U(r) \begin{pmatrix} R_f^{f-1} \\ R_f^{f+1} \end{pmatrix} - E \begin{pmatrix} R_f^{f-1} \\ R_f^{f+1} \end{pmatrix} = 0, \quad (2.18)$$

$$-\frac{\gamma_1 \hbar^2}{2} (1 - \mu) (\Delta_f R_f^f) + U(r) R_f^f - E R_f^f = 0, \quad (2.19)$$

$$-\frac{\gamma_1 \hbar^2}{2} (1 + 2\mu) (\Delta_1 R_0^1) + U(r) R_0^1 - E R_0^1 = 0, \quad (2.20)$$

де використано наступні позначення для коефіцієнтів та операторів:

$$\Delta_l = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2}, \quad \hat{B}_l^+ = \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r}, \quad \hat{B}_l^- = \frac{\partial}{\partial r} + \frac{(l+1)}{r},$$

$$C_1 = 1 + \frac{f-1}{2f+1} \mu, \quad C_2 = -\frac{3\sqrt{f(f+1)}}{2f+1} \mu, \quad C_3 = 1 + \frac{f+2}{2f+1} \mu, \quad \mu = \frac{2\gamma}{\gamma_1}.$$

Рівняння (2.20)–(2.21) будуть застосовуватися до сферичних наногетероструктур, у яких спін-орбітальна взаємодія є слабкою, що має місце у кремнію. Розв'язки цих рівнянь можна знайти як у КТ, так і у матриці [41].

Нехай Латгінджера КТ  $\gamma_1^{(1)}, \gamma_2^{(1)}, \gamma_3^{(1)}, \gamma^{(1)}$ , а матриці  $\gamma_1^{(2)}, \gamma_2^{(2)}, \gamma_3^{(2)}, \gamma^{(2)}$ . Якщо  $r \leq a$ , то розв'язки можна подати за допомогою сферичних функції Бесселя першого роду:

$$\begin{aligned} (R_f^{f-1})^{(1)} &= D_1^{(1)} j_{f-1}(\lambda^{(1)} r/a) + D_2^{(1)} j_{f-1}(\lambda^{(1)} \beta^{(1)} r/a), \\ (R_f^{f+1})^{(1)} &= -D_1^{(1)} \sqrt{\frac{f}{f+1}} j_{f+1}(\lambda^{(1)} r/a) + D_2^{(1)} \sqrt{\frac{f+1}{f}} j_{f+1}(\lambda^{(1)} \beta^{(1)} r/a), \end{aligned} \quad (2.22)$$

$$(R_f^f)^{(1)} = D_{f,f}^{(1)} j_f(\lambda^{(1)} r/a), \quad (2.23)$$

$$(R_0^1)^{(1)} = D_{1,0}^{(1)} j_1(\lambda^{(1)} \beta^{(1)} r/a), \quad (2.24)$$

де  $\lambda^{(1)} = \sqrt{(2Ea^2)/(\hbar^2 \gamma_1^{(1)} (1 - \mu^{(1)}))}$ ,  $\beta^{(1)} = \sqrt{(1 - \mu^{(1)})/(1 + 2\mu^{(1)})}$ . Якщо  $r > a$ , то розв'язками відповідних радіальних рівнянь будуть модифіковані сферичні функції Бесселя другого роду:

$$\begin{aligned} (R_f^{f-1})^{(2)} &= D_1^{(2)} k_{f-1}(\lambda^{(2)} r/a) + D_2^{(2)} k_{f-1}(\lambda^{(2)} \beta^{(2)} r/a), \\ (R_f^{f+1})^{(2)} &= D_1^{(2)} \sqrt{\frac{f}{f+1}} k_{f+1}(\lambda^{(2)} r/a) - D_2^{(2)} \sqrt{\frac{f+1}{f}} k_{f+1}(\lambda^{(2)} \beta^{(2)} r/a), \end{aligned} \quad (2.25)$$

$$(R_f^f)^{(2)} = D_{f,f}^{(2)} k_f(\lambda^{(2)} r/a), \quad (2.26)$$

$$(R_0^1)^{(2)} = D_{1,0}^{(2)} k_1(\lambda^{(2)} \beta^{(2)} r/a), \quad (2.27)$$

де  $\lambda^{(2)} = \sqrt{(2(U_0 - E)a^2)/(\gamma_1^{(2)} \hbar^2 (1 - \mu^{(2)}))}$ ,  $\beta^{(2)} = \sqrt{(1 - \mu^{(2)})/(1 + 2\mu^{(2)})}$ .

Знайдені розв'язки цих радіальних рівнянь необхідно „зшити“ на гетеромежах. Неперервність хвильової функції на гетеромежах безпосередньо дає три рівняння:

$$\left. \begin{pmatrix} (R_f^{f-1})^{(1)} \\ (R_f^{f+1})^{(1)} \end{pmatrix} \right|_{r=a} = \left. \begin{pmatrix} (R_f^{f-1})^{(2)} \\ (R_f^{f+1})^{(2)} \end{pmatrix} \right|_{r=a}, \quad (2.28)$$

$$(R_f^f)^{(1)} \Big|_{r=a} = (R_f^f)^{(2)} \Big|_{r=a}, \quad (2.29)$$

$$(R_0^1)^{(1)} \Big|_{r=a} = (R_0^1)^{(2)} \Big|_{r=a}. \quad (2.30)$$

Тут верхній індекс (1) стосується КТ, індекс (2) – матриці. Для одержання рівнянь, що впливають з неперервності нормальної складової потоку

густини ймовірності, обчислено нормальну складову вектора оператора швидкості за формулою, яка потім була записана у спірному зображенні. Таким чином отримано три рівняння для трьох типів станів [38, 41]:

$$\begin{pmatrix} \hat{T}_{11}^{(1)} & \hat{T}_{12}^{(1)} \\ \hat{T}_{21}^{(1)} & \hat{T}_{22}^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (R_f^{f-1})^{(1)} \\ (R_f^{f+1})^{(1)} \end{pmatrix} \Big|_{r=a} = \begin{pmatrix} \hat{T}_{11}^{(2)} & \hat{T}_{12}^{(2)} \\ \hat{T}_{21}^{(2)} & \hat{T}_{22}^{(2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (R_f^{f-1})^{(2)} \\ (R_f^{f+1})^{(2)} \end{pmatrix} \Big|_{r=a}, \quad (2.31)$$

$$\gamma_1^{(1)} (1 - \mu^{(1)}) \frac{\partial}{\partial r} (R_f^f)^{(1)} \Big|_{r=a} = \gamma_1^{(2)} (1 - \mu^{(2)}) \frac{\partial}{\partial r} (R_f^f)^{(2)} \Big|_{r=a}, \quad (2.32)$$

$$\gamma_1^{(1)} (1 + 2\mu^{(1)}) \frac{\partial}{\partial r} (R_0^1)^{(1)} \Big|_{r=a} = \gamma_1^{(2)} (1 + 2\mu^{(2)}) \frac{\partial}{\partial r} (R_0^1)^{(2)} \Big|_{r=a}, \quad (2.33)$$

де

$$\hat{T}_{11}^{\{1\}\{2\}} = -\frac{\gamma_1^{\{1\}\{2\}}}{2} \left[ \left( 1 + \frac{f-1}{2f+1} \mu^{\{1\}\{2\}} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{3(f-1)}{2(2f+1)} \frac{\mu^{\{1\}\{2\}}}{r} \right],$$

$$\hat{T}_{12}^{\{1\}\{2\}} = -\frac{3\sqrt{f(f+1)}}{2f+1} \gamma^{\{1\}\{2\}} \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{f+2}{r} \right),$$

$$\hat{T}_{21}^{\{1\}\{2\}} = -\frac{3\sqrt{f(f+1)}}{2f+1} \gamma^{\{1\}\{2\}} \left( \frac{\partial}{\partial r} - \frac{f-1}{r} \right),$$

$$\hat{T}_{22}^{\{1\}\{2\}} = -\frac{\gamma_1^{\{1\}\{2\}}}{2} \left[ \left( 1 + \frac{f+2}{2f+1} \mu^{\{1\}\{2\}} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{3}{2} \frac{f+2}{2f+1} \frac{\mu^{\{1\}\{2\}}}{r} \right].$$

Застосовуючи розв'язки рівняння Шредінгера з тризонним гамільтоніаном та граничні умови, одержано енергетичний спектр дірки та хвильові функції.

Розв'язки перші три розв'язки для усіх трьох типів станів. Результати обчислень енергії основного подано графічно на рис.2.4.

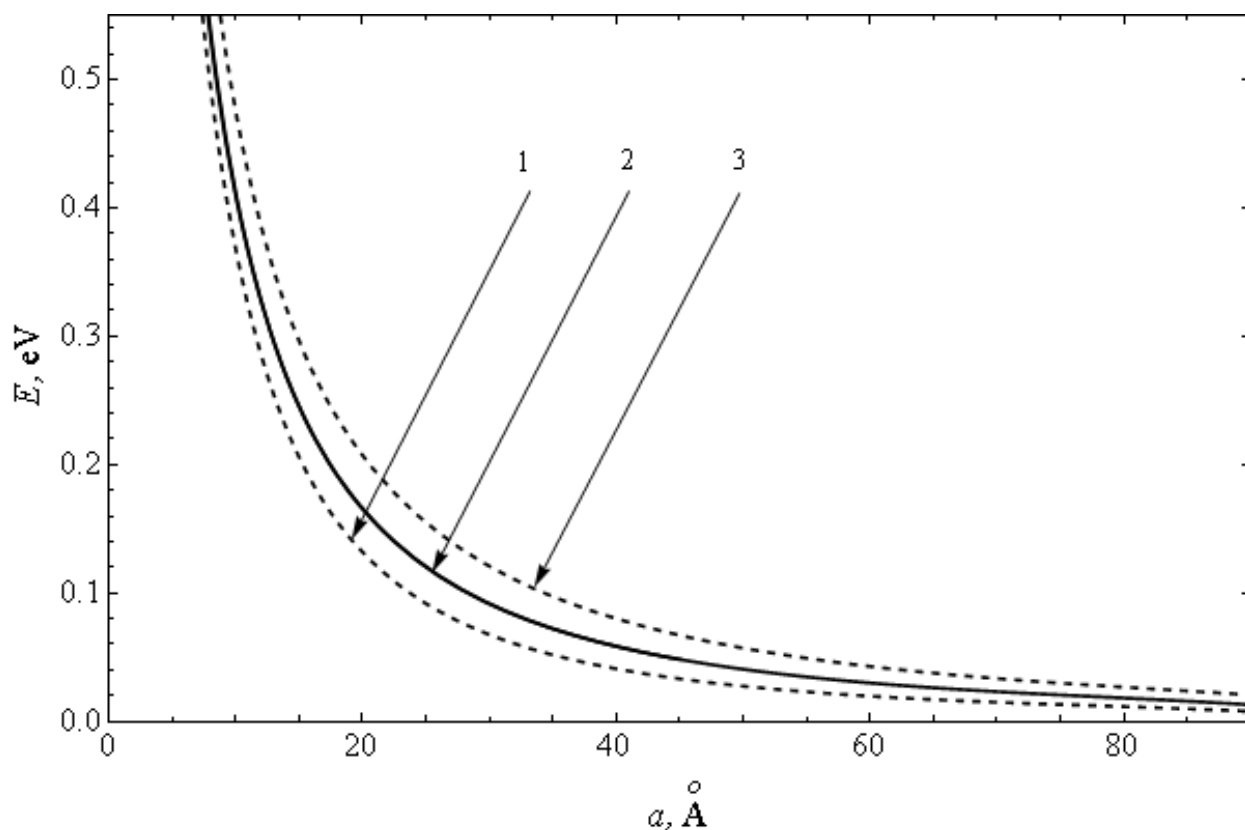


Рис. 2.4. Енергія основного стану дірки у сферичній КТ.

Якщо для обчислень взяти лише масу важкої дірки, то енергія опишеться кривою 1. Взнявши масу легкої діри енергія опишеться кривою 3. Ці дві криві (штрихові) отримані в межах однозонної моделі таким способом, про який згадувалося на початку параграфу. Крива 2 описує енергію основного стану в межах багатозонної (тризонної) моделі валентної зони. Звідси чітко видно, що нехтування складною структурою валентної зони приводить або до заниженої енергії, або завищеної порівняно з тризонною моделлю.

Крім основного стану визначено також і збуджені стани дірки. Якщо через  $n$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ) позначити номер розв'язку відповідної системи рівнянь, то, крім зазначених квантових чисел, енергія та хвильова функція

залежатимуть від ще одного квантового числа –  $n$ . Тому функції (2.16)

можна перепозначити так:  $\psi_{f,M}^{f-1,f+1} \equiv \psi_{n,f,M}^{f-1,f+1}$ ;  $\psi_{f,M}^f \equiv \psi_{n,f,M}^f$ ;  $\psi_{0,0}^1 \equiv \psi_{n,0,0}^1$ .

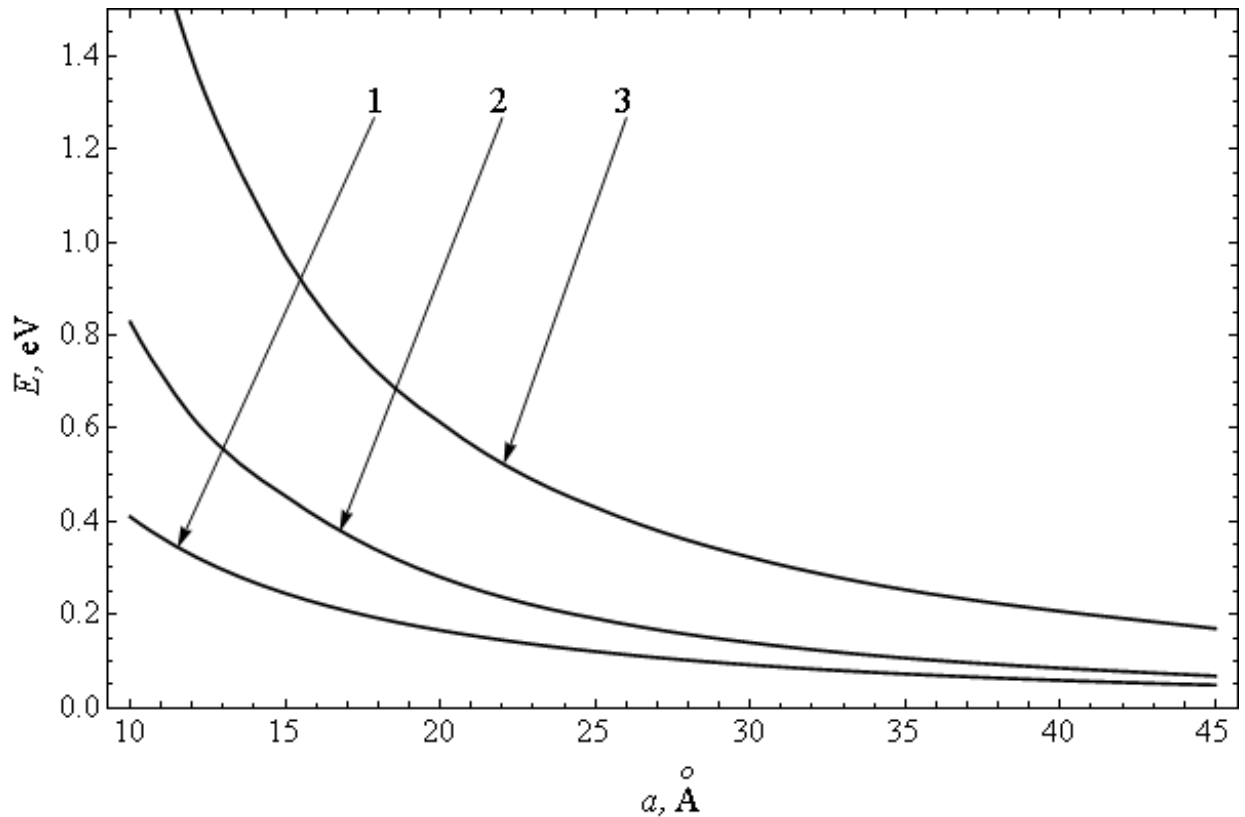


Рис.2.5. Залежність енергії дірки від розмірів квантової точки. Енергія стану  $\psi_{1,1,M}^{0,2}$  позначено кривою 1,  $\psi_{1,1,M}^1$  – кривою 2,  $\psi_{1,0,0}^1$  – кривою 3.

На рис.2.5 подано графіки залежності енергії дірки для основного стану та двох збуджених станів, що відповідають усім трьом типам станів. Аналогічно як і для електронних станів зменшення радіуса КТ веде до зростання енергії, внаслідок збільшення кінетичної енергії.

Запропонована модель діркових станів добре описує енергію дірки у випадку  $a > 10 \text{ Å}$ . Для менших радіусів КТ модель Латтінджера втрачає свою ефективність, і описувати діркові стани у КТ для малих розмірів не можна.

## **Висновки до розділу 2**

Визначено енергії електронних та діркових станів у сферичній КТ.

показано, що збільшення радіуса КТ веде до пониження енергії електрона та дірки.

Досліджено умови появи дискретних енергетичних станів у залежності від радіуса КТ.

Ці результати буде використано для побудови хвильової функції екситону при обчисленні екситонних станів у кремнієвій КТ.



## РОЗДІЛ 3 ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ЕКСИТОНУ У КРЕМНІЄВІЙ КВАНТОВІЙ ТОЧЦІ

### 3.1. Постановка та розв'язання задачі

Останнім часом проведено багато як теоретичних, так і експериментальних [42-45] досліджень кремнієвих КТ. Однак результати теоретичних робіт, що базуються на однозонній моделі валентної зони не завжди дають добрі числові результати, які б узгоджувалися з експериментальними даними. Саме тому в цій дипломній роботі розглянуто екситонні стани у сферичні КТ гетероструктури  $Si/SiO_2$  в рамках тризонної валентної зони. Гамільтоніан екситона записано у наступній формі:

$$\hat{H} = \hat{H}_h + \hat{H}_e + V(\vec{r}_e, \vec{r}_h) + E_g, \quad (3.1)$$

де  $E_g$  – енергія забороненої зони у кремнії. Потенціальна енергія взаємодії електрона з діркою  $V(\vec{r}_e, \vec{r}_h)$  визначається формулою:

$$V(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon|\vec{r}_e - \vec{r}_h|}. \quad (3.2)$$

Використання формули (3.2) можна вважати справедливим у випадку розгляду гетеросистем, для яких діелектричні проникності близькі. Для кремнієвої КТ в матриці оксиду кремнію таке наближення не зовсім вірне в загальному випадку, бо не зрозуміло діелектрична проникність якої складової гетеросистеми входить у формулу. Тому ми, щоб врахувати вплив матриці введемо середнє зважене діелектричної проникності по електронних станах:

$$\frac{1}{\epsilon} = \frac{W_{e,1}}{\epsilon_1} + \frac{W_{e,2}}{\epsilon_2}, \quad (3.3)$$

де  $W_{e, \{1,2\}}$  – ймовірність перебування електрона у КТ (індекс 1) та за її межами (індекс 2) для основного стану:

$$W_{e,1} = \int \psi_1(r, \theta, \varphi) dV = \int_0^a r^2 dr |R_1(r)|^2 \int_{\Omega} \sin \theta d\theta d\varphi |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 = \int_0^a r^2 dr |R_1(r)|^2,$$

$$W_{e,2} = \int \psi_2(r, \theta, \varphi) dV = \int_a^{\infty} r^2 dr |R_2(r)|^2 \int_{\Omega} \sin \theta d\theta d\varphi |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 = \int_a^{\infty} r^2 dr |R_2(r)|^2,$$

де  $R_{\{1,2\}}(r)$  функції, що визначено у розділі 2. Середнє зважене діелектричної проникності рахувалося на електронних функціях, бо хвильова функція електрона більше проникає в матрицю, ніж хвильова функція дірки. А більше проникнення хвильової функції у матрицю забезпечує більший вплив матриці на усереднену діелектричну проникність, що визначається за формулою (3.3). Причиною того, що хвильова функція електрона більше проникає у матрицю є менший потенціал обмеження для електронів, ніж для дірки. Другою причиною служить ефективна маса. Як уже зазначено було вище, можна ввести ефективну масу лежкої та важкої дірок через параметри Латтінджера:

$$m_{\{lh\}}^* = \frac{m_0}{\gamma_1 \pm 2\gamma},$$

де  $m_{lh}^*, m_{hh}^*$  – маси важкої та лежкої дірки. Середнє значення мас важкої та лежкої дірок є більшим від ефективної маси електрона, саме тому електрону легше проникати у матрицю.

Гамільтоніан дірки  $\hat{H}_h$  можна записати у наближенні тризонної моделі валентної зони за допомогою формули (2.15), а гамільтоніан електрона, нехтуючи анізотропністю закону дисперсії в методі ефективної маси, можна подати у вигляді (2.2).

Хвильову функцію основного стану екситона представлено у вигляді добутку одночастинкових хвильових функцій електрона і дірки:

$$\begin{aligned}\psi_0^{ex}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) &= \psi_{1,0,0}(\vec{r}_e) \psi_{1,M}^{0,2}(\vec{r}_h) = \\ &= R_{1,0}(r_e) Y_{0,0}(\theta_e, \varphi_e) I_0 \left( R_1^0(r_h) \Phi_{1,M}^0(\theta_h, \varphi_h) + R_1^2(r_h) \Phi_{1,M}^2(\theta_h, \varphi_h) \right),\end{aligned}\tag{3.4}$$

де  $I_0$  – одинична матриця розміром  $3 \times 3$ :

$$I_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$R_{1,0}(r_e)$  – радіальна частина хвильової функції, яка визначається сферичною функцією Бесселя першого роду в середині КТ та модифікованою сферичною функцією Бесселя другого роду. Радіальні частини хвильової функції для дірки основного стану визначено за допомогою формул (2.22) і (2.27), а спінори – (2.17). Їх вигляд наступний:

$$\begin{aligned}\Phi_{1,M}^0(\theta_h, \varphi_h) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{(M+1)M} Y_{0,M-1}(\theta_h, \varphi_h) \\ \sqrt{2(1-M)(1+M)} Y_{0,M}(\theta_h, \varphi_h) \\ \sqrt{(M-1)M} Y_{0,M+1}(\theta_h, \varphi_h) \end{pmatrix}, \\ \Phi_{1,M}^2(\theta_h, \varphi_h) &= \frac{1}{2\sqrt{5}} \begin{pmatrix} \sqrt{(2-M)(3-M)} Y_{2,M-1}(\theta_h, \varphi_h) \\ -\sqrt{2(2-M)(2+M)} Y_{2,M}(\theta_h, \varphi_h) \\ \sqrt{(2+M)(3+M)} Y_{2,M+1}(\theta_h, \varphi_h) \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Вибір хвильової функції екситона у вигляді (3.4) є виправданим у випадку невеликих радіусів КТ, коли  $a < a_{ex}^*$ , де ефективний радіус екситона  $a_{ex}^* \sim 45 \text{ \AA}$ . Для більших радіусів КТ хвильову функцію екситона не можна задавати у вигляді простого добутку хвильових функцій електрона і дірки, бо хвильова функція екситона має бути водневоподібною. Нижньою межею

застосування формули (3.4) є дуже малі радіуси КТ, для яких метод ефективної маси втрачає свою адекватність.

Слід відзначити, що, якщо врахувати спін електрона і дірки, при побудові хвильової функції екситона, то кулонівська взаємодія розщепить екситонні мультиплети внаслідок наявності обмінних інтегралів. Однак вплив обмінного розщеплення в кремнію не перевищує 30 meV та зменшується при зростанні радіуса КТ [38]. Тому у цій дипломній роботі нехтується обмінною взаємодією внаслідок її малості.

Підставляючи (3.4) у рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (3.1) та домножуючи на спряжену хвильову функцію (3.4), знайдено енергію основного стану екситона:

$$E_0^{ex} = E_{\psi_{1,0,0}^{el}}^e + E_{\psi_{1,M}^{0,2}}^h + E_g + \int d\vec{r}_e d\vec{r}_h (\psi_{1,0,0}^{el})^+ (\psi_{1,M}^{0,2})^+ V(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \psi_{1,0,0}^{el} \psi_{1,M}^{0,2}, \quad (3.5)$$

де  $E_{\psi_{1,0,0}^{el}}^e$ ,  $E_{\psi_{1,M}^{0,2}}^h$  – енергія основного стану не взаємодіючих електрона і дірки з однозонної моделі зони провідності та тризонної моделі валентної зони.

При обчисленні останнього інтегралу з метою обходження розбіжності, коли  $\vec{r}_e = \vec{r}_h$ , використано розклад кулонівського потенціалу по поліномах Лежандра:

$$\begin{aligned} W(\vec{r}_e, \vec{r}_h) &= \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \sum_{l=0}^{\infty} \left[ \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} P_l(\cos\gamma) \right] = \\ &= \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \sum_{l=0}^{\infty} \left[ \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} [Y_{l,m}^*(\theta_e, \varphi_e) Y_{l,m}(\theta_h, \varphi_h)] \right], \end{aligned} \quad (3.6)$$

де  $\gamma$  – кут між  $\vec{r}_e$  і  $\vec{r}_h$ ;  $r_{<}$  – менша з довжин  $r_e$  і  $r_h$ ,  $r_{>}$  – більша з довжин  $r_e$  і  $r_h$ ;  $Y_{l,m}$  – сферична функція. При обчисленнях використано три перших доданки з суми, що забезпечили добру збіжність результатів.

### 3.2. Аналіз результатів

За допомогою вище поданих формул проведено обчислення енергії екситона у сферичній кремнієвій квантовій точці. Екситон – це зв’язаний електрон-дірковий комплекс. Тому його енергія міститиме енергію електрона, дірки та енергію їх взаємодії. У другому розділі визначено енергію електрона і дірки як функції радіуса КТ. Для малих квантових точок (крім випадку надто малих, коли метод ефективної маси не можна застосовувати) з графіків рис.2.2, рис.2.5 видно, що основний енергетичний рівень електрона лежить вище дна зони провідності, а дірковий нижче вершини валентної зони масивного напівпровідника. Це приведе до зростання енергії міжзонного поглинання світла при утворенні екситона (крива 3, рис.3.1). Однак взаємодія між електроном і діркою (3.2), яка входить з від’ємним знаком, трохи зменшить результуючу енергію утворення екситона (крива 1 рис.3.1).

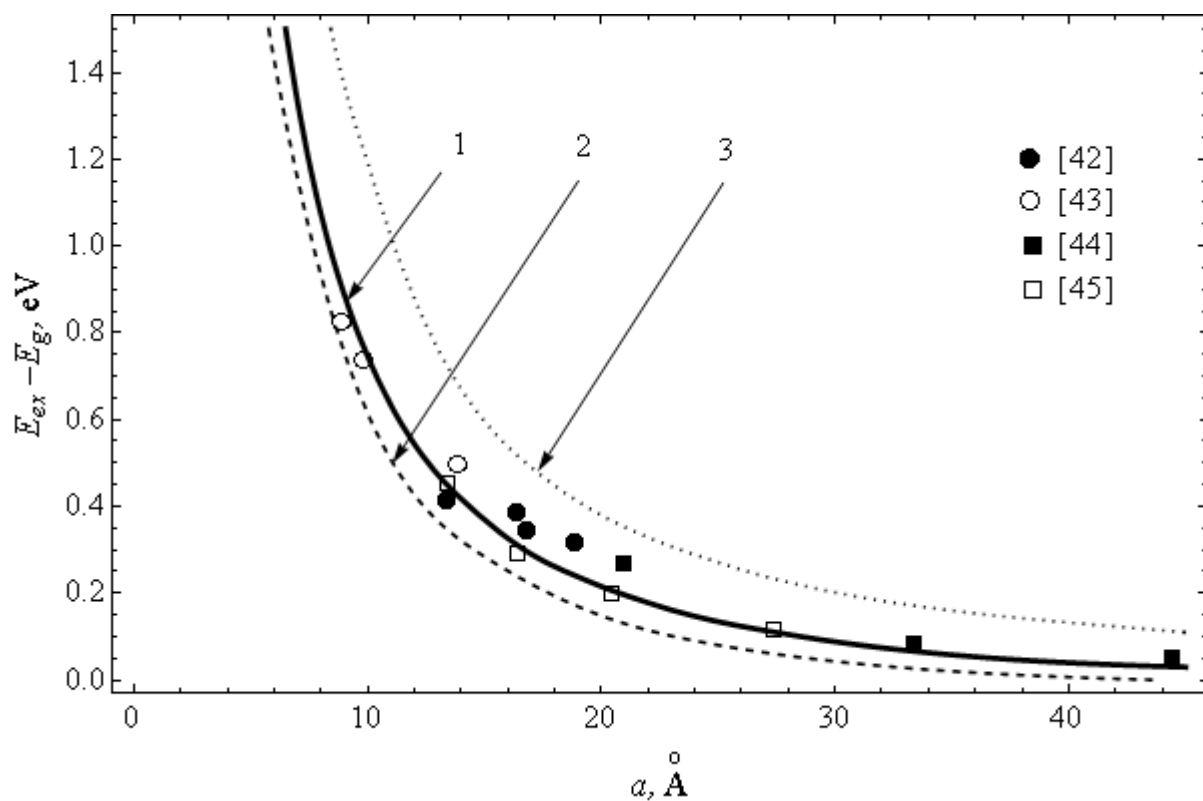


Рис.3.1. Енергія зв’язаної електрон-діркової пари у кремнієвій сферичній квантовій точці.

Результати обчислень подано графічно на рис.3.1. На графіку також подано експериментальні точки, що одержані авторами [42–45]. З графіка 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 дозволило встановити залежність енергії екситона, яку на графіку позначено суцільною кривою 1. Нехтуючи взаємодією електрона і дірки, можна одержати залежність енергії екситона від радіуса КТ, яку позначено пунктирною кривою 3. Ця енергія є більшою від попередньої. 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 2 (рис.2.6). Як видно з рис.2.6 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 2). Причину такої поведінки можна зрозуміти, якщо прийняти до уваги висновки попереднього розділу, де показано, що врахування лише зони важких дірок занижує енергію дірки.

З графіка видно досить непогану збіжність результатів теоретичних обчислень та експериментальних даних. Причому врахування складного зонного спектру веде до покращення збіжності результатів обчислень з експериментом. Для більш кращого порівняння експериментальних спектрів з теоретичними обчисленнями також необхідно враховувати розподіл нанокристалів за розміром та формою, а також те, що частина експериментальних даних отримана при кімнатних температурах. В цьому випадку можлива рекомбінація збуджених станів екситона, бо енергетична відстань між екситонними рівнями стає порядку  $kT$ .

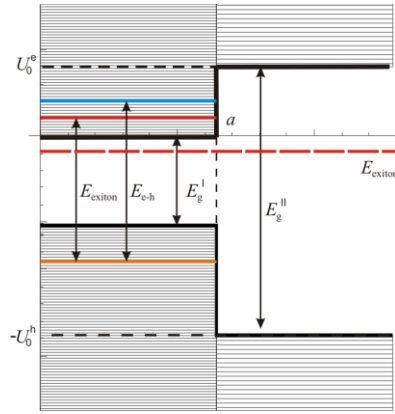


Рис.3.2. Схематична енергетична діаграма.

Хоча хвильова функція (3.4) не описує екситонні стани для квантових точок великих розмірів, однак вона дає прийнятні результати, що добре узгоджуються з експериментом для  $15 \text{ \AA} < a < 40 \text{ \AA}$ . Крім того слід зазначити, що на даний час існує мало достовірних експериментальних робіт, де досліджено екситонні спектри і кремнієвих КТ.

Визначені енергії екситона доцільно порівняти з відповідними енергіями екситона в масивному кристалі кремнію. Енергія екситона у масивних напівпровідниках визначається за формулою:

$$E_{exciton} = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 \epsilon^2} = -Ry \frac{\mu}{\epsilon^2} = -13.6 \frac{\mu}{\epsilon^2} \text{ eV},$$

де  $\mu = 0,165$  – зведена маса екситона у масивному кристалі кремнію. Враховуючи це,  $E_{exciton} = -17,3 \text{ meV}$ . Отже, у масивному кристалі кремнію енергія екситона від’ємна (штрихова лінія  $E_{exciton}$ , рис.3.2), а в КТ – додатна. Ці результати між собою мають узгоджуватися при зростанні радіуса КТ. Останнє веде до зменшення просторового обмеження електрона і дірки, тому їх енергетичні рівні зміщуються до дна зони провідності та вершини валентної зони відповідно. КТ переходить у масивний кристал, якщо  $a \rightarrow \infty$ . В цьому випадку сума енергії основного стану електрона та дірки дорівнює енергії забороненої зони у кристалі кремнію. Однак враховуючи взаємодію між ними веде до переходу енергія екситона у від’ємну область.

### Висновки до розділу 3

Отже, в розділі встановлено, однозонне наближення важкої дірки зміщує дірковий енергетичний рівень ближче до вершини валентної зони, а це веде до зменшення енергії екситона, порівняно з тризонним наближенням. Показано, що багатозонна модель валентної зони дає краще узгодження з експериментальними даними екситонних спектрів. Досліджено перехід результатів екситонних спектрів КТ в результати, які справедливі для масивного кристалу кремнію.



## **РОЗДІЛ 4 НАВЧАЛЬНІ ТА МЕТОДИЧНІ ПРАКТИКИ В КОНТЕКСТІ ВИВЧЕННЯ ЕКСИТОНІВ:**

### **4.1 Вивчення екситонних станів як частини навчальних курсів з фізики.**

Поняття екситону можна вводити при вивченні теми, пов'язаної з металами, напівпровідниками та діелектриками. Екситони є квазічастинками, які утворюються в напівпровідниках внаслідок взаємодії електронів та "дірок". "Дірка" – це місце в зоні провідності, де електрон може бути відсутній через те, що атом не має електрона у цьому стані. Отже екситон – це зв'язана пара, що складається з електрона та "дірки" у напівпровіднику, які утворюються внаслідок кулонівської взаємодії між ними. Залежно від властивостей кристалічної ґратки, екситони можуть мати різні характеристики. Екситони мають ефективну масу, яка відрізняється від ефективної маси вільного електрона. Їхня енергія залежить від властивостей матеріалу та розмірів квантової структури. Екситони можуть взаємодіяти з іншими носіями заряду у напівпровіднику, що впливає на їхні властивості.

Вивчення екситонів є важливим для розуміння оптичних та електронних властивостей напівпровідників, їхнього використання в електроніці, фотоніці та інших сферах сучасних технологій.

Фізичне походження екситонів полягає в кулонівській взаємодії між електронами та "дірками" (відсутність електронів у зоні провідності). Коли електрон поглинає фотон та переходить до зони провідності, виникає "дірка" у місці її попереднього знаходження. Електрон та "дірка" утворюють стабільну зв'язану пару через кулонівську взаємодію між ними, утворюючи екситон. Екситони мають квазічастинковий характер та важливі для розуміння оптичних та електронних властивостей напівпровідників. Екситони в термінах квантової механіки можна описати як квазічастинкові стани, які виникають внаслідок кулонівської взаємодії між електронами та

"дірками". Хвильова функція екситону представляє його квантовий стан та описує ймовірність знаходження електрона та "дірки" у певних точках кристалічної ґратки. Енергетичні рівні екситонів визначаються розв'язанням квантового рівняння Шрьодінгера для системи електрона та "дірки" з урахуванням кулонівської взаємодії. Екситони мають ефективну масу, що відрізняється від ефективної маси окремих електронів у напівпровіднику. Їхня енергія залежить від властивостей матеріалу та розмірів квантової структури. Взаємодія екситонів з іншими електронами та дефектами у кристалічній ґратці впливає на їхні властивості, включаючи час існування.

За допомогою квантової механіки ми можемо аналізувати властивості та поведінку екситонів у напівпровідникових структурах, що є ключовим для розуміння їхнього впливу на фізичні та оптичні властивості матеріалів.

Ефективна маса екситона ( $m^*$ ) визначається внаслідок квантовомеханічних розрахунків, враховуючи взаємодію електрона та "дірки". Вона може бути оцінена через маси електрона та "дірки" та параметри кристалічної решітки. Енергія екситона визначається як різниця між енергією електрона та "дірки" у зв'язаному стані та їхніми енергіями у вільному стані. Радіус екситона ( $r$ ) – це характеристика його просторового розподілу. Він визначається через дисоціаційну енергію та ефективну масу екситона. Час життя екситона ( $\tau$ ) пов'язаний з його дисоціацією та може бути розрахований з використанням ймовірностей рекомбінації та інших факторів.

Ці параметри дозволяють оцінити ключові характеристики екситонів у напівпровідникових структурах та їх вплив на фізичні властивості матеріалів. Розрахунки виконуються з використанням квантово-механічних методів та теорій взаємодії частинок.

Найбільш часто екситони досліджують у обмежених в просторі об'єктах або наноб'єктах. Це перш за все квантові ями та квантові точки. У квантових ямах, які є тонкими шарами напівпровідника, екситони утворюються внаслідок взаємодії електронів та "дірок" у площині квантової

ями. Квантові обмеження в напрямках перпендикулярних до площини ями створюють квантовані енергетичні рівні для електронів та "дірок", що впливає на утворення та властивості екситонів.

У квантових точках, які представляють собою нанорозмірні області матеріалу, електрони та "дірки" обмежені в тривимірних просторових областях. Це призводить до квантування енергій та утворення квантових рівнів. Екситони у квантових точках мають характеристики, які відрізняються від тих у квантових ямах через тривимірний характер обмеження.

Екситони у квантових структурах є ключовими для розуміння оптичних та електронних властивостей таких структур. Квантування енергій та обмеження носіїв заряду у квантових структурах впливають на формуцію та властивості екситонів, що має практичне значення для розробки напівпровідникових пристроїв.

При вивченні фізики важливо підкреслити необхідність знання різних оптичних методів при дослідженні напівпровідників: спектроскопія поглинання та випромінювання, експерименти з використанням лазерів.

Спектроскопія поглинання та випромінювання: Ці методи дозволяють вивчати властивості напівпровідникових матеріалів відповідно до їхнього поглинання та випромінювання світла. Спектроскопія поглинання дозволяє аналізувати, як матеріал поглинає світло різних довжин хвиль, тоді як спектроскопія випромінювання дозволяє досліджувати випромінювальні властивості матеріалу.

Експерименти з використанням лазерів: Лазери використовуються для проведення різноманітних експериментів, таких як спектроскопія, фотоелектрична спектроскопія, фотоемісійна спектроскопія тощо. Вони надають монохроматичне світло високої інтенсивності, що дозволяє вивчати різні аспекти поведінки напівпровідникових матеріалів.

Спектроскопія фотолюмінесценції: Цей метод використовується для вивчення фотолюмінісцентних властивостей матеріалу. Він полягає в

дослідженні випромінювання, яке виникає при переході електронів між рівнями енергії у матеріалі під впливом світла.

Ці оптичні методи дозволяють отримувати важливі дані про енергетичну структуру, кінетичні та оптичні властивості напівпровідникових матеріалів. Вони є основою для дослідження та розробки нових напівпровідникових пристроїв та технологій.

Підкреслимо, що це складає можливість застосування екситонів у сучасних технологіях.

Екситони використовуються у квантових точкових лазерах для генерації монохроматичного світла в області оптичного спектра. Це забезпечує високу ефективність лазерів, важливу для багатьох додатків, включаючи оптичну комунікацію та обробку сигналів.

Екситони є ключовими для оптоелектронних пристроїв, таких як фотодетектори, сонячні елементи та світлодіоди. Вони можуть вдосконалювати квантовий вихід та участь у генерації струму в цих пристроях.

Екситони мають потенціал для використання в квантових обчисленнях та квантових мережах. Вони можуть бути використані як носії квантової інформації та взаємодіяти з іншими квантовими системами для обчислення та обробки інформації.

Застосування екситонів в технологіях відкриває широкий спектр можливостей у сфері оптичних та квантових технологій, сприяючи розвитку сучасних пристроїв та систем для різних додатків.

## **4.2 Практичне використання знань про екситони у кремнієвих квантових точках у вищих навчальних закладах та школах.**

У сучасних умовах освіта повинна спрямовуватися на формування особистості, здатної адаптуватися та працювати в складних умовах сучасного світу. Це включає вміння визначати власну стратегію розвитку, бути відповідальним за неї та здатність до етичних виборів, навчатися протягом усього життя та самореалізації.

Проте, спостерігається тенденція до перегляду освітніх програм, зокрема зменшення кількості годин, відведених на вивчення фізики у педагогічних, будівельних та медичних спеціальностях. Це може призвести до недооцінки ролі фізики як науки та невірною сприйняття її важливості у розвитку суспільства.

Для вирішення цієї проблеми необхідно здійснювати аргументовану пояснювальну роботу серед студентів вже на початкових етапах навчання. Важливо донести до них, що відкриття у галузі фізики сприяли накопиченню величезної кількості інформації, створенню нових ідей та теорій, що відобразилося на розвитку інших наук, технологій та галузей промисловості. Такий підхід дозволить активізувати інтерес до вивчення фізики та розкрити її суттєвий внесок у сучасний світ.

Важливою метою навчання фізики в загальноосвітніх закладах є сприяння засвоєнню учнями системи фізичних знань та розвиток їх здатності застосовувати ці знання в практичній діяльності та процесі пізнання. Вивчення фізики передбачає формування учнями уявлень про основні концепції, закони та принципи фізики та їх інтеграцію у загальну систему знань.

Процес засвоєння учнями матеріалу неможливий без застосування отриманих знань у різних практичних ситуаціях. Одним із ключових аспектів навчання фізики є його прикладна та практична спрямованість.

Студенти повинні навчитися застосовувати фізичні принципи та концепції для розв'язання задач, виконання лабораторних робіт та проєктів.

Одним із критеріїв успішного засвоєння матеріалу є вміння учнями практично застосовувати отримані знання, зокрема у вирішенні задач та проведенні лабораторних експериментів з фізики. Ці види діяльності сприяють розвитку мислення та пізнавальних здібностей учнів.

Отже, можна виділити основні види навчально-пізнавальної діяльності під час вивчення матеріалів з прикладного спрямування у фізиці.

Застосування елементів проблемного навчання на початку уроку для зацікавлення учнів та створення позитивного ставлення до подальшого вивчення. Використання прикладів, пов'язаних з практичним застосуванням вивчаємого явища чи процесу, під час розгляду теоретичних питань. Задачі, які передбачають застосування вивчених концепцій та принципів у практичних завданнях. Домашні завдання з підготовки доповідей, що базуються на матеріалах прикладного характеру та вимагають презентації під час уроку.

Наприклад, під час вивчення розділу "Будова атома" важливим є розгляд будови та принципу дії квантових генераторів - лазерів. Учням слід наголосити на тому, що лазерні технології є важливими для сучасних технологічних пристроїв, таких як комп'ютери, CD та DVD пристрої, принтери, миші, та інші.

Активна участь учнів у виконанні лабораторних робіт, що дозволяють візуалізувати та експериментувати з фізичними явищами. Проведення досліджень, спрямованих на вивчення конкретних аспектів фізики та їх вплив на практичне застосування. Наприклад, лабораторні роботи з електроніки, які дають уявлення про принципи роботи електричних ланцюгів та їх можливі застосування.

Розв'язування задач прикладного характеру на уроках фізики є ключовою складовою навчального процесу. Прикладне спрямування у цих завданнях дозволяє демонструвати, як фізичні теорії та закони

застосовуються на практиці, впливаючи на технологічний прогрес та підвищуючи ефективність виробничої діяльності. Використання прикладних прикладів у навчанні допомагає пояснити новий матеріал та надихати учнів на активну участь у навчальному процесі. Ці задачі забезпечують практичне застосування фізичних знань, розвивають творче мислення та навички аналізу, сприяючи кращому засвоєнню матеріалу та глибшому розумінню фізичних концепцій. Такий підхід сприяє підготовці учнів до практичного використання фізичних знань у реальних ситуаціях.

Загальна послідовність дій під час розв'язування різних типів прикладних фізичних задач може бути наступною: спочатку, вивчення умови та уточнення змісту нових термінів і виразів; далі, короткий запис умови з необхідними малюнками, схемами, та графіками (фізичні величини виражені у Міжнародній системі одиниць); наступно, аналіз умови задачі, щоб зрозуміти її фізичну суть, встановити фізичні явища, процеси, стани системи та необхідні закони й закономірності для розв'язку; далі, складання плану розв'язування; потім, вираження зв'язків між невідомими та відомими величинами у формулах; після цього, розв'язування системи рівнянь для одержання невідомого; після цього, обчислення шуканої величини; наступно, аналіз отриманих результатів; та завершення, пошук та аналіз інших шляхів розв'язування.

Розв'язування учнями різних видів фізичних задач прикладного спрямування сприяє глибокому та свідомому освоєнню ними системи фізичних знань, отриманню практичних навичок та умінь, а також усвідомленню того, як фізичні теорії, закони та закономірності застосовуються на практиці. Це впливає на розвиток техніки, господарства та підвищує ефективність виробничої діяльності кваліфікованих працівників.

Також важливим є виконання учнями проектів з фізики прикладного спрямування. Проектна діяльність є методом, спрямованим на розвиток самостійних дослідницьких умінь, творчих здібностей та логічного мислення. Вона сприяє об'єднанню та застосуванню знань, отриманих під

час навчання, та формуванню предметних компетентностей учнів. Прикладний характер проектної діяльності передбачає ознайомлення з методами наукового пізнання та дослідження природних явищ, формування умінь спостерігати та експериментувати з використанням вимірювальних приладів, які мають практичне застосування. Також важливим є розуміння відмінностей між науковою і ненауковою інформацією та цінність науки для задоволення потреб у побуті, виробництві та культурі.

Розв'язування учнями різних видів фізичних задач прикладного спрямування сприяє глибокому та свідомому освоєнню ними системи фізичних знань, отриманню практичних навичок та умінь, а також усвідомленню того, як фізичні теорії, закони та закономірності застосовуються на практиці. Це впливає на розвиток техніки, господарства та підвищує ефективність виробничої діяльності кваліфікованих працівників.

Також важливим є виконання учнями проектів з фізики прикладного спрямування. Проектна діяльність є методом, спрямованим на розвиток самостійних дослідницьких умінь, творчих здібностей та логічного мислення. Вона сприяє об'єднанню та застосуванню знань, отриманих під час навчання, та формуванню предметних компетентностей учнів. Прикладний характер проектної діяльності передбачає ознайомлення з методами наукового пізнання та дослідження природних явищ, формування умінь спостерігати та експериментувати з використанням вимірювальних приладів, які мають практичне застосування. Також важливим є розуміння відмінностей між науковою і ненауковою інформацією та цінність науки для задоволення потреб у побуті, виробництві та культурі.

В контексті фізики прикладного спрямування можна звернути увагу на екситони - квазічастинки, які виникають в результаті взаємодії світла з близько розташованими електронами та дірками у твердих тілах. Екситони мають важливе значення в розумінні властивостей напівпровідників та в розробці нових технологій. Розгляд екситонів та їх вплив на фізичні процеси є важливим етапом вивчення фізики прикладного спрямування.



#### **Висновки до розділу 4**

Навчальні та методичні практики в контексті вивчення екситонів є ключовими для усвідомлення та освоєння цієї важливої фізичної концепції. Врахування їх в навчальних програмах сприяє формуванню у студентів глибокого розуміння фізичних принципів, що керують поведінкою екситонів у квантових системах. Методичні аспекти включають в себе ефективні методи навчання та використання відповідних педагогічних засобів, спрямованих на підвищення якісного рівня засвоєння цього складного матеріалу. Ці практики сприяють формуванню у майбутніх фахівців навичок аналізу та дослідження властивостей екситонів, що має важливе значення для подальших наукових досліджень та розвитку сучасних технологій.

## Висновки

У даній роботі здійснено теоретичне дослідження екситонного енергетичного спектру кремнієвої КТ з врахуванням багатозонних моделей валентної зони, що дозволило встановити:

- а) межі адекватного застосування методу ефективної маси для кремнієвих КТ та межі використання сконструйованої хвильової функції екситона;
- б) енергія екситона залежить від розмірного квантування електрона і дірки;
- в) теоретичне обчислення екситонних станів визначається вибором моделі валентної зони;
- г) що в рамках тризонної моделі одержується більше значення енергії екситона, ніж в однозонній;
- д) якісну та добру кількісну збіжність результатів обчислень з експериментальними даними.

## Список використаних джерел

1. Екимов А.И. Квантовый размерный эффект в трехмерных микрокристаллах полупроводников / А.И. Екимов, А.А. Онущенко // Письма в ЖЭТФ. – 1981. – Т. 34, № 6. – С. 363-366.
2. Эфрос Ал.Л. Межзонное поглощение света в полупроводниковом шаре / Ал.Л. Эфрос, А.Л. Эфрос // ФТП. – 1982. – Т. 16, № 7. – С. 1209-1214.
3. Марченко В.И. О топологическом порядке структуры атомно-шероховатых границ кристаллов / В.И. Марченко // Письма ЖЭТФ. – 1982. – Т. 35, № 11. – С. 459-461.
4. Григорян Г.Б. Квантование дырки и край поглощения в сферических микрокристаллах полупроводников со сложной структурой валентной зоны / Г.Б. Григорян, Э.М. Казарян, А.Л. Эфрос [и др.] // ФТТ. – 1990. – Т. 32, № 6. – С. 1772-1779.
5. Леденцов Н.Н. Упорядоченные массивы квантовых точек в полупроводниковых матрицах / Н.Н. Леденцов, В.М. Устинов, С.В. Иванов [и др.] // Успехи физ. наук. – 1996. – Т. 166, № 4. – С. 423-428.
6. Алфёров Ж.И. История и будущее полупроводниковых гетероструктур / Ж.И. Алфёров // ФТП. – 1998. Т. 32, № 1. – С. 3-18.
7. Латтінжер Д.М. Рух електронів і дірок в збурених періодичних полях / Д.М. Латтінжер, В. Кон // Фізичний огляд Т. - 1955. - Т. 97, № 4. - С. 869 - 888.
8. Pavesi L. Optical gain in silicon nanocrystals / L. Pavesi, Dal Negro L, Mazzoleni C, Franzo G, Priolo F. // Nature. – 2000. – Vol. 408. – P. 440.

9. Hybertsen M.S. Absorption and emission of light in nanoscale silicon structures / M.S Hybertsen // Phys. Rev.Lett. – 1994. – Vol. 72, P. 1514.
10. Kovalev D. Intrinsic photoluminescence of adamantane in the ultraviolet spectral region / D. Kovalev, H. Heckler, M. Ben-Chorin, G. Polisski, M Schwartzkopff, F. Koch // Phys. Rev.Lett. – 1998. Vol. – 81. P.2803.
11. Kovalev D. Effect of ammonia adsorption on charge carriers in mesoporous silicon of n- and p-type conductivity / D Kovalev, E Gross, N Kunzner, F Koch, Timoshenko V.Yu, M Fujii. // Phys. Rev. Lett. – 2002. – Vol. **89**, No. 137. – P. 401.
12. Chelikowsky J.R, Quantum confinement effects in Ge [110] nanowires / J.R Chelikowsky, S.G Louie.// Phys. Rev.- 1997- Lett. **79**, 1770
13. Reboredo F.A Hole levels and exciton states in CdS nanocrystals / F.A Reboredo, A Franceschetti, A. Zunger, // Phys. Rev.- 2000- B **61**, 13 073.
14. Franceschetti A. Exciton dissociation and interdot transport in CdSe quantum-dot molecules / A Franceschetti, A Zunger, // Phys Rev -2000- B **62**, 2614
15. Delley B, Quantum confinement in Si nanocrystals / B Delley, E.F Steigmeier. // Phys Rev-1993- B 47 1397
16. Delley B. Size dependence of band gaps in silicon nanostructures / B Delley, E.F Steigmeier. // Appl Phys -1995-Lett 67 2370
17. Vasiliev L. Ab initio absorption spectra of Ge nanocrystals / Vasiliev L, S.Ogut, J.R. Chelikowsky // Rev-2002- B 65 115416
18. Delerue C. Quantum Confinement and Optical Gaps in Si Nanocrystals/ C Delerue, M Lanoo, G Allan.// Phys Rev -1996-Lett 76 3038
19. S.Y. Calculations of surface effects on phonon modes and Raman intensities of Ge quantum dots / Ren Phys Rev-1997- B55 4665

20. Leung K. Electron-hole interactions in silicon nanocrystals / K Leung, K.B Whaley. // Phys Rev-1997- B 56 7455
21. Wolkin M.V. Single-Beam and Enhanced Two-Beam Second-Harmonic Generation from Silicon Nanocrystals by Use of Spatially Inhomogeneous Femtosecond Pulses / M.V Wolkin.et al.// Phys. Rev-1999- Lett 82 197
22. Niquet Y.M. Confinement effects in PbSe quantum wells and nanocrystals / Y.M Niquet, C Delerue, G Allan, M Lannoo. // Phys Rev-2000- B 62 5109
23. See J. Coulomb Blockade in Silicon Devices: Electronic Structure of Quantum Dots/ J See, P Dollfus, S Galdin. Phys. Rev. -2002- B **66**, 193 307
24. Babic D, Theory of excitonic exchange splitting and optical Stokes shift in silicon nanocrystallites: Application to porous silicon / D Babic, R Tsu, R.F Greene.// Phys. Rev.- 1991- B **45**, 14 150
25. Takagahara T, Theory of the quantum confinement effect on excitons in quantum dots of indirect-gap materials / T Takagahara, K Takeda. // Phys. Rev.- 1992- B **46**, 15 578
26. Khurgin J.B, Effective exponent for the size dependence of luminescence in semiconductor nanocrystallites / J.B Khurgin, E.W Forsythe, G.S Tompa, B.A Khan. // Appl. Phys. - 1996 Lett. 69, 1241.
27. Trwoga P.F. Modeling the contribution of quantum confinement to luminescence from silicon nanoclusters / P.F Trwoga, A.J Kenyon, C.W Pitt. // Appl. Phys.- 1998- 83, 3789.
28. Бурдов В.А. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования / В.А Бурдов. // ЖЕТФ 121-2002-С. 480
29. Бурдов В.А. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования / В.А Бурдов. // ФТП 36-2002-С. 1233
30. Garoufalis C.S. Electronic Structure of 1 to 2 nm Diameter Silicon Core/Shell Nanocrystals: Surface Chemistry, Optical Spectra, Charge

- Transfer, and Doping / C.S Garoufalis, A.D Zdetsis, S Grimme. // Phys. Rev. -2001- Lett. 87, 276 402.
31. Williamson A.J. Immobilized azobenzenes for the construction of photoresponsive materials / A.J Williamson, J.C Grossman. R.Q Hood, A Puzder, G Galli. // Phys. Rev. -2002- Lett. 89, 196 803.
  32. Baldereschi A. Spherical Model of Shallow Acceptor States in Semiconductors / A Baldereschi, N.O Lipari. // Phys. Rev. -1973- B 8, 269.
  33. Dresselhaus G, Energy Levels of Indirect Excitons in Semiconductors with Degenerate Bands / G Dresselhaus, A.F Kip, C Kittel.// Phys. Rev. -1955- 98, 398.
  34. Гельмонт Б.Л. Акцепторные уровни в полупроводниках со структурой алмаза / Б.Л. Гельмонт, М.И. Дьяконов // ФТП. – 1971. – Т 5, № 11. – С. 2191-2193
  35. 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
  36. Menéndez-Proupin E. Electric-field and exciton structure in CdSe nanocrystals / E. Menéndez-Proupin, C. Trallero-Giner // Phys. Rev. B. – 2004. – Vol. 69, № 12. – P. 125336-125345
  37. 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.
  38. Москаленко А.С. Экситоны в нанокристаллах Si / А.С. Москаленко, И.Н. Ясиевич // ФТТ. – 2004. – Т. 46, № 8. – С.1465-1475.

39. Moskalkenko A.S. Single-particle states in spherical Si/SiO<sub>2</sub> quantum dots / A.S Moskalkenko, J. Berakdar, A.A. Prokofiev [and al.] // *Phys. Rev. B.* – 2007. – Vol. 76, № 8. – P. 085427-085436.
40. Devanathan V. *Angular Momentum Techniques in Quantum Mechanics* / V. Devanathan. – New York/Boston/Dordrecht/London/Moscow: Kluwer Academic Publishers, 2002. – 242 p.
41. Boichuk V.I. Hole, impurity and exciton states in a spherical quantum dot / V.I. Boichuk, I.V. Bilynskyi, R.Ya. Leshko // *Condensed Matter Physics.* – 2010. – Vol. 13, № 1. – P. 13702(1)-13702(12).
42. Kanzawaa Y. Size-dependent near-infrared photoluminescence spectra of Si nanocrystals embedded in SiO<sub>2</sub> matrices / Y. Kanzawaa, T. Kageyamaa, S. Takeokaa [and al.] // *Solid State Commun.* – 1997. – Vol. 102, № 7. – P. 533-537.
43. Guha S. Characterization of Si nanocrystals grown by annealing SiO<sub>2</sub> 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.
44. 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.
45. Watanabe K. Resonant excitation of Er<sup>3+</sup> by the energy transfer from Si nanocrystals / K. Watanabe, M. Fujii, S. Hayashi // *J. Appl. Phys.* – 2001. – Vol. 90, № 9. – P. 4761-4766.

## Додаток А

Таблиця А.1. Параметри кристалів

кристал	$a_0,$ Å	$m_{e\perp},$ $m_0$	$m_{e\parallel},$ $m_0$	$\gamma_1,$ $m_0$	$\gamma,$ $m_0$	$\varepsilon$	$E_g,$ eV	$\chi,$ eV	$\Delta_{so}$ eV
<i>Si</i>	5.43	0.190	0.916	4.22	1.02	11.4	1.12	4.05	0.04 <sup>c</sup>
<i>SiO<sub>2</sub></i>	5.40	1	1	5	0	3.8	8.62	0.85	-



## Додаток Б

Програми для обчислень в середовищі Mathematica

### Програма для визначення електронних станів

```
eq8=Sin[kk*b]*□1*□*b+Sin[kk*b]*□1+□2*Cos[kk*b]*kk*b-□2*Sin[kk*b]□0; Z=1; ab=0.529*10^(-10);
□1=0.553; □2=1; W2=0; W1=-3.2/2/13.59; b=a;
```

```
kk=√(2+1) ( EE· W1 ) ; □=√(2+1) ( EE· W2 ) ; qq=Part[eq8,1]; Z=1; Plot[qq,{EE,W1,-0.105}]
```

```
eq9=FindRoot[qq□0,{EE,-0.114}]
```

```
{EE□-0.114769}
```

```
Eel=eq9[[1,2]]*2*Ry+3.2
```

```
0.0786534
```

```
kk=kk/.eq9; □=□/.eq9; g1[r_]=A1*Sin[kk*r]/r; g2[r_]=A2*Exp[-□*r]/r; eq4=g1[b]-g2[b]□0;
```

```
eq5=Solve[eq4,A2][[1]]; g1[r]; g2[r_]=g2[r]/.eq5; eq6=1==∫_0^b g1[x]^2 dx + ∫_b^∞ g2[x]^2 dx ;
eq7=Solve[eq6,A1][[2]]; g1[r_]=g1[r]/.eq7; g2[r_]=g2[r]/.eq7;
```

```
RR10[r1_]=If[r1□a,g1[r1],g2[r1]];
```

### Програма для визначення діркових станів

```
DOperator[A_,expr_]/;FreeQ[A,D]:=A expr
```

```
DOperator[L1_+L2_,expr_]:=DOperator[L1,expr]+DOperator[L2,expr]
```

```
DOperator[A_ L_,expr_]/;FreeQ[A,D]:=A DOperator[L,expr]
```

```
DOperator[A:HoldPattern[D[_]&],expr_]:=A[expr]
```

```
DOperator[L1__**L2_,expr_]:=Expand[DOperator[L1,DOperator[L2,expr]]]
```

```
DOperator[L1_^n_Integer,expr_]/;n>1:=Nest[Expand[DOperator[L1,#1]]&,expr,n]
```

```
Dr=D[#,r]&;
```

```
Bp[l_]=Dr-l/r;
```

```
Bm[l_]=Dr+(l+1)/r;
```

```
SphericalBesselK[f_,x_]=√(x^(1/2)) BesselK[1/2 (1+2 f),x]/√x ;
```

```
□in=(2□in)/□1in; Ain=-□1in/2; □1out=1/5; Aout=-□1out/2; □out=0; Bin=□in*Ain; Bout=□out*Aout;
```

```
mv=5; □in=(2□in)/□1in; Ain=-□1in/2; □=√(En a^2 / (Ain (1+□in))) ; □=√(1+□in / (1+2+□in)) ; k=√(2 mv En UOh / 1) a;
```

```
C1in[f_]=(1+(f-1)/(2f+1) □in); C2in[f_]=-((3√(f (f+1))) / (2f+1)) □in; C3in[f_]=(1+(f+2)/(2f+1) □in);
```

```
C1out[f_]=(1+(f-1)/(2f+1) □out); C2out[f_]=-((3√(f (f+1))) / (2f+1)) □out; C3out[f_]=(1+(f+2)/(2f+1) □out);
```

```
eq1in[f_]=C1in[f]*D[DOperator[Bp[f-2]**Bm[f-1],Rfm1in[r,f]]]+C2in[f]*D[DOperator[Bm[f]**Bm[f+1],Rfp1in[r,f]]]□-En/Ain*Rfm1in[r,f];
```

```
eq2in[f_]=C2in[f]*D[DOperator[Bp[f]**Bp[f-1],Rfm1in[r,f]]]+C3in[f]*D[DOperator[Bm[f+2]**Bp[f+1],Rfp1in[r,f]]]□-En/Ain*Rfp1in[r,f];
```

```

eq1out[f_]=C1out[f]*D[DOperator[Bp[f-2]**Bm[f-1],Rfm1out[r,f]]]+C2out[f]*D[DOperator[Bm[f]**Bm[f+1],Rfp1out[r,f]]]□-(En+U0h)/Aout*Rfm1out[r,f];
eq2out[f_]=C2out[f]*D[DOperator[Bp[f]**Bp[f-1],Rfm1out[r,f]]]+C3out[f]*D[DOperator[Bm[f+2]**Bp[f+1],Rfp1out[r,f]]]□-(En+U0h)/Aout*Rfp1out[r,f];
Rfm1in[r_,f_]=A1*SphericalBesselJ[f-1,□/a*r]+A2*SphericalBesselJ[f-1,□*□/a*r];
Rfp1in[r_,f_]=-√(f/□-1) A1*SphericalBesselJ[f+1,□/a*r]+A2 √(f/□-1) *SphericalBesselJ[f+1,□*□/a*r];
Rfm1out[r_,f_]=(B1+B2)*SphericalBesselK[f-1,k/a*r];
Rfp1out[r_,f_]=(-√(f/□-1) B1+B2 √(f/□-1) )*SphericalBesselK[f+1,k/a*r];
T11in[f_]=-(□1in/2)((1+(f-1)/(2f+1) □in)Dr+(3(f-1))/(2(2f+1)) □in/r);
T12in[f_]=(3√(f/□-1) )/(2f+1) □1in/2 □in*(Dr+(f+2)/r);
T21in[f_]=(3√(f/□-1) )/(2f+1) □1in/2 □in*(Dr-(f-1)/r);
T22in[f_]=-(□1in/2)((1+(f+2)/(2f+1) □in)Dr+(3(f+1))/(2(2f+1)) □in/r);
T11out[f_]=-(□1out/2)((1+(f-1)/(2f+1) □out)Dr+(3(f-1))/(2(2f+1)) □out/r);
T12out[f_]=(3√(f/□-1) )/(2f+1) □1out/2 □in*(Dr+(f+2)/r);
T21out[f_]=(3√(f/□-1) )/(2f+1) □1out/2 □out*(Dr-(f-1)/r);
T22out[f_]=-(□1out/2)((1+(f+2)/(2f+1) □out)Dr+(3(f+1))/(2(2f+1)) □out/r);
eq1[f_]=Rfm1in[a,f]-Rfm1out[a,f];
eq2[f_]=Rfp1in[a,f]-Rfp1out[a,f];
eq3[f_]=(D[DOperator[T11in[f],Rfm1in[r,f]]]+D[DOperator[T12in[f],Rfp1in[r,f]]]-
(D[DOperator[T11out[f],Rfm1out[r,f]]]+D[DOperator[T12out[f],Rfp1out[r,f]]]))/r□a;
eq4[f_]=(D[DOperator[T21in[f],Rfm1in[r,f]]]+D[DOperator[T22in[f],Rfp1in[r,f]]]-
(D[DOperator[T21out[f],Rfm1out[r,f]]]+D[DOperator[T22out[f],Rfp1out[r,f]]]))/r□a;
Mat[f_]={ { Coefficient[eq1[f],A1],Coefficient[eq1[f],A2],Coefficient[eq1[f],B1],Coefficient[eq1[f],B2] },
  { Coefficient[eq2[f],A1],Coefficient[eq2[f],A2],Coefficient[eq2[f],B1],Coefficient[eq2[f],B2] },
  { Coefficient[eq3[f],A1],Coefficient[eq3[f],A2],Coefficient[eq3[f],B1],Coefficient[eq3[f],B2] },
  { Coefficient[eq4[f],A1],Coefficient[eq4[f],A2],Coefficient[eq4[f],B1],Coefficient[eq4[f],B2] } };
dysp[f_,En_]=Det[Mat[f]];
f=1; a=27*10^(-10)/(0.529177*10^(-10)); □1in=4.22; □2in=0.39; □3in=1.44; □in=1/5(3□3in+2□2in); □in=11.4;
□out=3.9; Ry=13.5984; U0h=4.3/2/Ry;
Plot[dysp[f,En],{En,-0.01,0},PlotRange□{-10^(-100),10^(-100)}]
EE[0]=FindRoot[dysp[f,En]□0,{En,-0.004}]
{En□-0.00394849}
rfp1in[r_]=Rfp1in[r,f]/.EE[0];
rfm1in[r_]=Rfm1in[r,f]/.EE[0];
rfp1out[r_]=Rfp1out[r,f]/.EE[0];
rfm1out[r_]=Rfm1out[r,f]/.EE[0];
cof=Solve[{(eq1[f]/.EE[0])□0,(eq2[f]/.EE[0])□0,(eq3[f]/.EE[0])□0},{B1,B2,A2}][[1]];

```

```

rfp1in[r_]=((rfp1in[r])/cof);
rfm1in[r_]=((rfm1in[r])/cof);
rfp1out[r_]=((rfp1out[r])/cof);
rfm1out[r_]=((rfm1out[r])/cof);
Norma=1==A1^2*(NIntegrate[((rfp1in[r]/A1)^2+(rfm1in[r]/A1)^2)*r^2,{r,0,a}]+NIntegrate[((rfp1out[r]/A1)^2+(r
fm1out[r]/A1)^2)*r^2,{r,a,∞}]);
AA=Solve[Norma,A1][[2]];
RRfp1in[r_]=((rfp1in[r])/AA);
RRfm1in[r_]=((rfm1in[r])/AA);
RRfp1out[r_]=((rfp1out[r])/AA);
RRfm1out[r_]=((rfm1out[r])/AA);
RRfp1[r_]=If[r<a,RRfp1in[r],RRfp1out[r]];
RRfm1[r_]=If[r<a,RRfm1in[r],RRfm1out[r]];
Plot[(RRfp1[r2]*r2)^2+(RRfm1[r2]*r2)^2,{r2,0,1.5a}]

```

Програма для обчислення екситонних станів

```

Y[l_,m_,∅_,∅_]=SphericalHarmonicY[l,m,∅,∅];P[n_]:= (4*Pi)/(2n+1)
Sum[Conjugate[Y[n,m,∅1,∅1]]*Y[n,m,∅2,∅2],{m,-n,n}];
Π=Abs[RR10[r1]]^2*1/(4Pi)*(Abs[RRfm1[r2]]^2*1/(4Pi)-
RRfm1[r2]*RRfp1[r2]*4/√10 1/√4 Pi Y[2,0,∅2,∅2]+Abs[RRfp1[r2]]^2*1/10(3*Abs[Y[2,-
1,∅2,∅2]]^2+4*Abs[Y[2,0,∅2,∅2]]^2+3*Abs[Y[2,1,∅2,∅2]]^2));
WW[r1_,r2_,z_]:=P[Piecewise]{
  {1/∅ | z/n o | r2^n / r1^n 1 Pi n | , And [r1<b,r2<b,r2<r1] },
  {1/∅ | z/n o | r1^n / r2^n 1 Pi n | , And [r1<b,r2<b,r1<r2] },
  {1/∅ | z/n o | r1^n / r2^n 1 Pi n | , And [r1<b,r2>b]},
  {1/∅ | z/n o | r2^n / r1^n 1 Pi n | , And [r1>b,r2<b]},
  {1/∅ | z/n o | r2^n / r1^n 1 Pi n | , And [r1>b,r2>b,r2<r1]},
  {1/∅ | z/n o | r1^n / r2^n 1 Pi n | , And [r1>b,r2>b,r1<r2]}
}
W[z_]:=NIntegrate[WW[r1,r2,z]*r1^2*r2^2*Sin[∅1]*Sin[∅2]*Π,{r1,0,a,∅},{r2,0,a,∅},{∅1,0,Pi},{∅2,0,Pi},{∅1,
0,2Pi},{∅2,0,2Pi}]
PP=W[10]*2*Ry
-0.167536
Exiton=-PP+Eel-(EE[0])[1,2]*2*Ry
0.0924249

```