

**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 ВЛАСНИХ
ЕНЕРГЕТИЧНИХ СТАНІВ ВОДНЕВОПОДІБНОЇ ДОМШКИ У
СФЕРИЧНІЙ КВАНТОВІЙ ТОЧЦІ**

Кваліфікаційна робота студента групи ФМм-22
ступінь вищої освіти магістр

Спеціальності 014.08 Середня освіта (Фізика)

Деменцова Михайла Олеговича

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, Деменцов Михайло Олегович, 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

ВСТУП	4
РОЗДІЛ 1 КОРОТКИЙ ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД. АКТУАЛЬНІСТЬ ПРОБЛЕМИ.....	8
1.1 Опис теоретичних моделей для аналізу домішок у квантових точках.....	9
1.2 Домішкові центри у квантових ямах та квантових дротах.....	11
1.3 Вплив донорних та акцепторних домішок на енергетичні спектри квазічастинок у квантових точках.....	14
Висновки до розділу 1	20
РОЗДІЛ 2 ДОМІШКОВІ СТАНИ В НАПІВПРОВІДНИКОВИХ КРИСТАЛАМ. ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ.....	21
2.1 Локалізований стан електрона в неідеальній ґратці.....	21
2.2 Рух у полі центральної сили. Радіальне рівняння Шредінґера.....	24
2.3 Рух у полі центральної сили. Атом водню.....	30
Висновки до розділу 2	32
РОЗДІЛ 3 ДОМІШКОВІ СТАНИ В НАПІВПРОВІДНИКОВИХ КРИСТАЛАМ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ. АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ.....	33
3.1 Модель сферичної квантової точки з скінченим розривом зон.....	33
3.2. Аналіз результатів.....	38
3.3 Вивчення донорних станів як частини навчальних курсів з фізики.....	42
Висновки до розділу 3	46
ВИСНОВКИ.....	47
СПИСОК ЛІТЕРАТУРНИХ ДЖЕРЕЛ.....	48
ДОДАТОК.....	54

ВСТУП

На сучасному етапі дуже важко уявити сучасну фізику твердого тіла без напівпровідникових наноструктур. Напівпровідникові наноструктури і особливо подвійні наноструктури, включаючи квантові ями, нитки і точки, являються сьогодні предметом досліджень двох третин досліджуваних об'єктів в області фізики напівпровідників.

При цьому появилася можливість управління типом провідності напівпровідника за допомогою легування різними домішками та ідея інжекції нерівноважних носіїв заряду. Вони стали базою, із якого виросла напівпровідникова електроніка. Однак наноструктури дають можливість вирішити значно більш загальну проблему управління фундаментальними параметрами у напівпровідникових кристалах і приладах з шириною забороненою зоною, ефективними масами носіїв і їх рухливості, показником заломлення, електронним енергетичним спектром і т. д.

Розвиток фізики і технології напівпровідникових наноструктур призвів до значних змін у нашому повсякденному житті. Електронні прилади на основі наноструктур широко використовуються у багатьох областях людської діяльності. Не можливо уявити наше життя без телекомунікаційних систем, заснованих на лазерах з подвійною наноструктурою, без наноструктурних світлодіодів і біполярних транзисторів, у тому числі у системах супутникового телебачення. Сонячні елементи з наноструктурами широко використовуються як для космічних, так і для земних програм. Так, наприклад, космічна станція уже майже 10 років використовує сонячні елементи на основі AlGaAs - наноструктур.

Вивчення властивостей кристалів малих розмірів необхідно, як для дальшого розвитку електроніки, так і для удосконалення вже існуючих напівпровідникових приладів. В останні роки напівпровідникові

наноструктури розвиваються від двовимірних до одновимірних і навіть до нульвимірних. Внаслідок того, що рух електрона в нульвимірних структурах є обмеженим у всіх трьох напрямках, слід чекати більш очевидних квантових розмірних ефектів. Наприклад, утворюються дискретні енергетичні рівні, як у великих кристалах, а енергетичні рівні сильно залежать від розміру квантової точки. Існує велика кількість експериментальних та теоретичних вимірювань оптичних та електричних властивостей таких систем. Були спроби використання даних систем в мікроелектроніці, як пристосування пам'яті, створенням дуже впорядкованого ряду ультратонких пластин.

В хімії малі напівпровідникові кристали використовуються, як каталізатори і фотосенсиори. У випадку CdS та інших кристалів спостерігались певні зміни в електронному поглинанні і спектрах збудження.

Дослідження власних енергетичних станів водневоподібної домішки в сферичній квантовій точці є актуальним і важливим напрямом в сучасній фізиці та технологіях. Квантові точки (КТ) є наноматеріалами з унікальними властивостями, зокрема, квантовими ефектами, які залежать від їхнього розміру та структури. Власні енергетичні стани в КТ є ключовими, оскільки визначають їхні електронні та оптичні властивості. Розуміння цих енергетичних станів дозволяє ефективно впливати на властивості КТ та використовувати їх у різних сферах, включаючи фотоелектроніку, сенсори, оптоелектроніку, квантові обчислення тощо.

Дослідження водневоподібних домішок в сферичних КТ передбачає вивчення впливу конкретних параметрів системи, таких як розмір квантової точки, матеріал, навколишня середовище та інші фактори, на енергетичну

структуру та властивості. Це дозволяє оптимізувати дизайн КТ для конкретних застосувань та розробляти нові матеріали з покращеними характеристиками.

Такі дослідження сприяють розширенню наших знань про фізичні процеси в наноматеріалах та відкривають нові горизонти для застосування квантових точок у сучасних технологіях і визначають **актуальність** магістерського дослідження.

Метою дослідження є глибоке вивчення та аналіз власних енергетичних станів водневоподібної домішки в сферичній квантовій точці. Це включає дослідження впливу різних факторів, таких як розмір квантової точки, параметри матеріалу та навколишнього середовища, на енергетичну структуру та властивості системи, а також в наданні студентам глибокого розуміння квантових явищ, поглиблення знань у сфері фізики, розвитку абстрактного та аналітичного мислення, а також практичних навичок в розв'язанні складних фізичних задач.

Мета визначає основні **завдання** магістерської роботи:

- Засвоєння теоретичних понять та основних принципів, що лежать в основі вивчення енергетичних станів у квантових системах.
- Розуміння квантових явищ та їх впливу на власні енергетичні стани системи.

- Вивчення методів та технік розрахунку енергетичних рівнів для водневоподібної домішки у сферичній квантовій точці.
- Набуття практичних навичок у виконанні обчислень, аналізу результатів та висновків на основі отриманих енергетичних спектрів.
- Навчання методам обчислення енергетичних рівнів, використання специфічних математичних підходів для аналізу квантових систем.
- Оцінка та аналіз отриманих результатів, підготовка звітів та публікацій для дискусій та обговорень в університетському середовищі.

Ці методичні аспекти спрямовані на створення навчального середовища, що сприяє розвитку аналітичних, дослідницьких та практичних навичок у студентів у контексті вивчення власних енергетичних станів водневоподібних домішок в квантових точках.

Об'єктом дослідження є квантові системи, зокрема структури сферичних квантових точок з водневоподібною домішкою.

Предметом дослідження є фізичні та квантово-механічні властивості водневоподібної домішки в структурах сферичних квантових точок. Це включає аналіз енергетичних рівнів, спектральних характеристик, оптичних властивостей, впливу зовнішніх умов та взаємодію частинок у цих системах.

РОЗДІЛ І КОРОТКИЙ ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД. АКТУАЛЬНІСТЬ ПРОБЛЕМИ.

У 80-ті роки, прогрес у фізиці двовимірних гетероструктур з квантовими ямами і їх використання, зацікавив багатьох вчених і спонукав до вивчення системи, яка володіє ще меншою розмірністю – квантових дротів (КД) і квантових точок (КТ). На відміну від квантових ям, де носії обмежені в напрямку, і можуть рухатися вільно в площині шару, в КД носії заряду обмежені в двох напрямках і вільно переміщуються тільки вздовж осі дроту. В квантових ”точках” – “штучних атомах”, носії заряду обмежені вже у всіх трьох напрямках і володіють повністю дискретним енергетичним спектром.

Експериментальна робота по виготовленню і вивченню структур з КД була почата більше 10 років назад [3]. В той самий час було виконане теоретичне дослідження проблем, пов'язаних із одним найбільш цікавим застосуванням – лазером на КД [3]. Автори [4] вказували на можливість послаблення температурної залежності густини порогового струму для КД лазера і на повну температурну стабільність лазерів на КТ. До сьогодення часу в даній області уже є значне число як теоретичних, так і експериментальних робіт. Були вивчені транспортні і ємнісні властивості КД; вивчалось вертикальне і поперечне тунелювання в структурах з КД і КТ. В лазерних КД структурах були виконані вимірювання фотолюмінесценції в дальшій інфрачервоній області спектру, проведені вимірювання оптичного підсилення і вивчення особливостей оптичних властивостей особливо поляризаційних ефектів. Як видно, найбільшого успіху у створенні КД лазерів досягнули автори роботи [5].

Однак до цих пір прогрес в цій області здійснюється досить помалу, і реалізація найбільш цікавого застосування структур з КД все ще попереду.

Перші напівпровідникові точки- мікрочастинки з'єднань A^2B^6 , сформовані в скляній матриці, були представлені і реалізовані в [6]. Ця робота ініціювала важливі теоретичні дослідження КТ, початі в [7]. Однак оскільки напівпровідникові КТ були поміщені в ізоляційну скляну матрицю і якість гетерограниці між склом і напівпровідниковою точкою була не високою це створювало визначені обмеження як для фундаментальних досліджень, так і застосувань до приладів. Значно більші можливості появились з створенням тривимірних КТ, когерентних з оточуючою їх напівпровідниковою матрицею [8].

1.1 Опис теоретичних моделей для аналізу домішок у квантових точках

Як правило, електронні властивості напівпровідників при низьких температурах визначають домішки. Їхня наявність у низькорозмірних структурах також вплине на властивості цих систем. У залежності від валентності стороннього атома будуть або донорні, або акцепторні домішки. Значна частина дослідників [6-7, 9-15] моделює взаємодію електрона з йоном домішки у вигляді кулонівської потенціальної енергії взаємодії зарядів у однорідному середовищі з діелектричною проникністю ϵ :

$$V(r) = -\frac{e^2}{\epsilon r}. \quad (1.1)$$

Введення діелектричної проникності можна вважати правильним, якщо радіус домішкового стану набагато більший від сталої ґратки. А як зазначено вище, остання умова ще і є умовою придатності методу ефективної маси. Оскільки домішковий центр нерухомий, то під ϵ розуміють статичну

діелектричну проникність. Така потенціальна енергія взаємодії йона домішки з електроном повністю виключає з опису всі індивідуальні характеристики домішки, що пов'язані з її хімічною природою. Тому в такому наближенні енергетичні рівні всіх домішок у заданому кристалі будуть однаковими, але властивості домішок у гетероструктурах сильно залежатимуть від їх параметрів і навпаки. Для врахування потенціальної енергії донора на досить малих відстанях використовувався короткодійний екранований потенціал [16]:

$$V_{sc}(r) = C \frac{e^2}{\epsilon r} \exp(-r/l_D),$$

де l_D – довжина екранування, C – експериментальна константа. У роботах [17-18] також проводилось дослідження глибоких домішкових центрів з використанням потенціалу нульового радіуса, потужністю $\gamma = 2\pi/\alpha$:

$$V_\delta(\vec{r}, \vec{R}_a) = \gamma \delta(\vec{r} - \vec{R}_a) \left[1 + (\vec{r} - \vec{R}_a) \nabla_r \right],$$

де α – параметр, що визначається енергією зв'язку електронного локалізованого стану на тому ж домішковому центрі в масивному напівпровіднику, $\vec{R}_a = (x_a, y_a, z_a)$ – координати домішкового центра.

Домішка може у кристалі взаємодіяти з однією чи багатьма квазічастинками, утворюючи зв'язані стабільні комплекси. Такі ефекти стало можливим виявити при пониженні розмірності масивних кристалів. У зв'язку з виявленням і дослідженням нових квантових ефектів в область уваги дослідників потрапили такі об'єкти, як зв'язаний тричастинковий позитивно-негативний комплекс – тріон. З набору позитивно і негативно заряджених частинок можна скласти різні варіанти цього комплексу: 2 електрони і дірка (X^-), 2 дірки і електрон (X^+), йонізований донор та екситон (D^+, X), йонізований акцептор та екситон (D^-, X), двовалентна донорна (D^2) та акцепторна (A^2) домішка. Про можливе існування тріонів

було заявлено у 1958 році [58]. Але внаслідок малої енергії зв'язку у тріонах, їх виявити експериментально вдалося лише у 1992 році [59] в напівпровідниковій гетероструктурі з квантовою ямою. Тобто їх виявлення стало можливим тільки унаслідок використання ефектів, пов'язаних з пониженням розмірності.

Як відомо, ідеальна КТ з скінченним потенціалом на гетеромежі має скінченне число електронних чи діркових дискретних станів. Однак внаслідок кулонівського поля домішки з'являється нескінченне число дискретних станів. А наявність домішки у квантовій антиточці, у якої на відміну від КТ внутрішня частина є потенціальним бар'єром, а не ямою, приведе до появи дискретних і квазістаціонарних станів, які у випадку без домішки відсутні.

1.2. Домішкові центри у квантових ямах та квантових дротах

Технології молекулярно-пучкової епітаксії зробили можливим вирощувати високоякісні гетероструктури із заданими властивостями. Чергування різних шарів гетероструктури обмежує електрони і дірки в потенціальних ямах, що веде до ефективного зростання енергії забороненої зони аж до енергії, що відповідає видимому діапазону [18]. Проведені експериментальні дослідження у [19] виявили енергетичну структуру, що лежить нижче від ліній міжзонних переходів. Такого роду експерименти можна пояснити на основі введення в теоретичний розгляд домішок. Робота [6] була одна з перших про зв'язані енергії водневоподібної домішки в нескінченній потенціальній ямі. Розглядалася водневоподібна домішка, що знаходиться у надгратці. Нехтуючи тунелюванням між іншими ямами, було проведено дослідження спектра домішки у тонкій плівці на заданій відстані від межі поділу середовищ. З використанням методу ефективної маси

варіаційним способом обчислено енергію основного стану й енергію зв'язку донора та акцептора як функцію товщини плівки і розташування домішки. Також розглянуто коефіцієнти оптичного поглинання. Використовуючи цей самий метод, пізніше цим же автором обчислено енергію екситону у квантовій ямі [20]. Варіаційні хвильові функції вибирались на основі хвильових функцій частинки у потенціальній ямі з врахуванням параметра, що відповідає за домішку:

$$\psi(\vec{r}) = N \begin{cases} \cos k_1 z \cdot \exp\left(-\frac{1}{\lambda} \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}\right), & |z| \leq L/2, \\ 0, & |z| > L/2, \end{cases}$$

де N – стала нормування, $k_1 = \pi/L$, z_i – задає координати домішки, λ – варіаційний параметр, L – товщина плівки. Використовуючи модель нескінченно високого бар'єра в [20], крім основного стану, варіаційним методом визначено ще і збуджені стани домішки. Також встановлено залежність спектрів від розташування домішки. Нехтуючи тунелюванням між складовими гетероструктури, автори [6, 21] отримали завищені значення енергії. Врахування скінченного бар'єра дозволило авторам [22] одержати більш реалістичні результати. Обчислення проведено за допомогою варіаційного методу для основного та першого збудженого стану. Хвильову функцію вибрано у вигляді добутку функцій частинки у скінченній потенціальній ямі на набір функцій Гауса. Обчислення густини ймовірності підтвердили можливість проникання електрона в сусідні ями, причому для збудженого стану ці ефекти виражені чіткіше. Одержані результати показали, що, крім параметрів потенціальної ями, на енергію домішки значно впливатимуть і параметри бар'єра

Значна частина теоретичних та експериментальних досліджень присвячена квантовим дротам. Зокрема дослідження домішкових станів у КД проведено в [7, 23]. У роботах обчислено енергію водневоподібної домішки, що розташована у КД, зокрема розглянуто випадок домішки на осі

КД. Для таких 1D систем, як і для 2D, у більшості випадків для обчислення використовувалися варіаційні методи.

Енергія зв'язку донорної домішки у циліндричному КД детально досліджена у [24]. Одержано енергії зв'язку як функції товщини дроту і розташування домішки по відношенню до осі циліндра. Потенціал обмеження вибирався як нескінченно високим, так і скінченним на основі параметрів розриву зон гетероструктури. Результати продемонстрували монотонне зростання енергії зв'язку домішки при зменшенні розмірів КД для нескінченно високого потенціального бар'єра. Для скінченного бар'єра одержано максимум енергії зв'язку і подальше її зменшення. Інтенсивне дослідження домішкових станів у КД стимульоване вивченням рухливості носіїв та процесів розсіяння на домішках, що розташовані як у КД, так і за його межами [73]. Встановлено, що у випадку розсіяння на фонових домішках (background impurities) рухливість зменшується із зменшенням радіуса КД, як $[\ln(ka)]^{-2}$, де k – хвильовий вектор Фермі для вільних електронів. У випадку розсіяння на віддалених домішках залежність рухливості, що зумовлена домішками, від розмірів КД визначається розподілом домішок зовні КД. Коли ж розподіл домішок є однорідним, то рухливість не залежить від розмірів КД.

Одна з перших робіт, де враховано анізотропність ефективної маси електрона у КД за наявності домішки, є робота [9]. Тут записано гамільтоніан системи у наближенні анізотропної ефективної маси з використанням моделі нескінченного розриву зон. Шляхом зміни масштабу вимірювання відстаней та штучного введення у гамільтоніан варіаційних параметрів, одержано новий гамільтоніан у вигляді суми $\mathbf{H} = \mathbf{H}_{01}(\alpha) + \mathbf{H}_{02}(\beta) + \mathbf{H}'(\alpha, \beta)$. Перші два доданки вважалися нульовим гамільтоніаном, який давав можливість розділити координати і знайти точні розв'язки, а третій – вважався збуренням. Причому вважалось, що можна

отримати збурення малим, змінюючи варіаційні параметри α , β . На основі проведених обчислень побудовано графіки залежності енергії основного стану та енергії зв'язку від радіуса циліндричного КД. Визначені енергетичні спектри домішок у КД дали можливість надалі теоретично вивчати домішкові стани за наявності магнітних полів [24]. Зокрема встановлено, що, як і для КЯ, енергія зв'язку у магнітному полі зростає порівняно з випадком відсутності поля.

1.3. Вплив донорних та акцепторних домішок на енергетичні спектри квазічастинок у квантових точках

Подальший розвиток фізики наногетероструктур привернув увагу дослідників до систем, що володіють ще меншою розмірністю – квантових точок. Гетероструктури з КТ показали свою ефективність у сонячних батареях порівняно з традиційними структурами [25-27]. Зокрема запропоновано донорно-акцепторні ультратонкі сонячні батареї на основі нанокристалів [27]. Лазери на КТ мають кращі характеристики порівняно з лазерами на КЯ [28]. Одержані лазери на КТ характеризуються високою температурною стабільністю та низьким значенням гранично допустимої густини струму [29-30]. На відміну від КЯ і КД, ідеальні КТ мають повністю дискретний спектр і скінченне число дискретних станів. Однак присутність домішки, кулонівське поле якої приведе до появи нескінченного числа дискретних станів, змінить багато властивостей КТ. Зокрема в [31-32] експериментально показано вплив як донорних, так і акцепторних домішок на спектральні характеристики КТ.

Теоретично властивості домішок у КТ описані у роботах [11-14]. У цих працях, як і в більшості робіт, використовувався метод ефективної маси для обчислень. Так як поперечні та повздовжні змінні не можна розділити, то

домішкові стани КЯ та КД не можна знайти точно. На відміну від цих випадків, рівняння Шредінгера для водневоподібної домішки у сферичній КТ має точні розв'язки. Точні розв'язки для домішки у центрі сферичної КТ одержано авторами [11-12, 15]. Як і в інших роботах, розрив зон (потенціал обмеження) вибрано у вигляді сферично-симетричної потенціальної ями як скінченної, так і нескінченної величини. Внаслідок сферичної симетрії можна розділити змінні у рівнянні Шредінгера і одержати радіальне рівняння, яке розв'язується точно. Розрахунок показує, що значення енергії квантових рівнів обмеженого електрона у сферичній КТ із бар'єром скінченної висоти є відмінними від відповідних рівнів при нескінченній висоті бар'єра. Відмінність зростає, якщо радіус КТ зменшується. Встановлено, що порядок енергетичних рівнів залишається таким самим як при скінченній, так і нескінченній висоті бар'єра. Також показано, що послідовність рівнів та виродження для електрона у сферичній КТ з домішкою схожі до енергетичної структури одноелектронної КТ, але і одночасно відрізняються від структури енергетичних рівнів у кулонівському полі. Характер залежності енергетичних рівнів донора аналогічний до рівнів електрона у КТ, якщо потенціал ями є сильнішим від потенціалу, який створює донор. У роботі [9] визначено $1s$ ($n=1, l=0$), $2s$ ($n=2, l=0$), $2p$ ($n=2, l=1$) енергетичні стани водневоподібної домішки, що розташована у центрі КТ, де n – головне квантове число, l – орбітальне. Показано, що два стани ($2s, 2p$), які вироджені у вільному атомі водню, розщеплюються у КТ, якщо радіус КТ стає меншим восьми ефективних радіусів Бора. А якщо радіус КТ більший від десяти ефективних радіусів Бора, то енергетичні рівні ($2s, 2p$) вироджуються і прямують до значень, яке має енергія $n=2$ стану водневоподібної домішки у масивних кристалах.

Слід зауважити, що домішки можуть розташовуватися де-небудь у КТ і що енергії зв'язку і порядок рівнів буде змінюватися, якщо змінюється положення домішки у КТ. Ґрунтуючись на точно отриманих розв'язках,

квантові рівні й енергії донора, розташованого не в центрі сферичної КТ, можна отримати, використовуючи варіаційний метод. Саме це було зроблено у роботі [14]. У межах наближення ефективної маси записано гамільтоніан водневоподібного донора у сферичній КТ, де йон донора розташований на відстані D від центра сфери. Потенціал обмеження має симетричну форму, і в цій роботі його задано сферично-симетричною прямокутною ямою скінченної глибини. Так як радіальні та кутові змінні не можна розділити, то рівняння Шредінгера точно розв'язати не можна. Тому у роботі використано лінійний варіаційний метод. Хвильову функцію вибрано у вигляді розкладу по системі функцій, що відповідає випадку розташування домішки у центрі КТ. Таким чином одержано результати для основних і збуджених станів для донора у КТ. Зокрема проаналізовано розщеплення та зміну порядку квантових рівнів у залежності від радіуса КТ, відстані D і глибини потенціальної ями.

Також залежність енергії системи від розташування домішки розглядалась у роботі [31]. Там показано, що енергії оптичних переходів залежать від розмірів КТ і від розташування домішкового центру. Змінюючи розміри КТ та розташування домішки, можна налаштувати гетеросистему на ту чи іншу довжину хвилі випромінювання.

Як уже зазначалось вище, у загальному випадку діелектрична проникність для наногетероструктур є різною, тобто залежить від координат. Тому, враховуючи це, у роботі [32] варіаційним методом визначено енергію основного стану домішки у сферичній *GaAs* КТ з врахуванням просторового діелектричного екранування. Результати показали, що ефекти просторової зміни діелектричного екранування для акцепторів є значно більшими, ніж для донорів. Це зумовлено тим, що у *GaAs* ефективна маса дірки більша від ефективної маси електрона, а ефективний радіус Бора є меншим. Показано, що просторова зміна діелектричного екранування підсилює енергію зв'язку, коли радіус квантової точки стає малим.

Відмінність між діелектричними проникностями КТ і матриці за наявності водневоподібної домішки враховано у роботі [16]. Отримано енергетичний спектр і хвильові функції домішкового електрона у сферичних квантових точках у середовищах з різною ефективною масою та величинами діелектричної проникності. Отримані точні розв'язки рівняння Шредінгера узгоджуються з експериментальними даними спектрів локалізованого домішкового екситону у малих квантових точках *CdS*. Розв'язки подано за допомогою функцій Кулона та Віттекера.

Для послідовного врахування різних діелектричних проникностей КТ і матриці необхідно розв'язати рівняння Пуассона. У роботах [18-22, 33] для заряджених частинок у сферичних КТ розв'язано рівняння Пуассона. На основі цих розв'язків визначено енергію взаємодії електрона і дірки з поляризаційними зарядами, що виникають на гетеромежах з врахуванням існування перехідного шару, де діелектрична проникність залежить від координати, так і без його врахування. Також визначено енергію взаємодії двох заряджених частинок, які можуть перебувати як у матриці, так і у КТ. Використання цих потенціальних енергій для обчислень енергії електрона, дірки та екситона у першому порядку теорії збурень показало, що у випадку, коли діелектрична проникність КТ більша від матриці, то ефективні потенціальні ями зменшуються, тому енергія частинок збільшується. Аналітичні результати цих робіт можна використати для запису потенціальної енергії взаємодії електрона з йоном домішки і для обчислення поправок до домішкових рівнів, що і зроблено у представленій дисертації.

З покращенням експериментальної бази стало можливим визначати тонку структуру розщеплення спектра для простої квантової точки [34-35]. Теоретично тонку структуру енергетичних рівнів водневоподібної домішки, що розташована в центрі сферичної квантової точки, обчислено у праці [15], де використано простий точний розв'язок для донора у сферичній КТ. Теоретично показано, що не існує радіусів КТ, при яких не можна знайти

енергію домішки. А сама тонка структура домішки обчислена методами теорії збурень. Обчислено поправки, що враховують спін-орбітальну взаємодію, різницю між нерелятивістською і релятивістською кінетичними енергіями, доданок Дарвіна. Отримано, що поправки залежать від квантового числа j (що виражає повний момент імпульсу), а також орбітального квантового числа l , бо поправки ΔE залежить від значень $\langle 1/r \rangle$, $\langle 1/r^2 \rangle$, $\langle 1/r^3 \rangle$, які у свою чергу залежать від l . Тому виродження $2p_{1/2} - 2s_{1/2}$ енергетичних станів знімається квантовою точкою. Коли ж радіус КТ має граничні значення (дуже малий чи великий), сумарна енергія E для зазначених рівнів вироджується, як і у вільному атомі водню.

Хоча теорія донорних домішок вже добре розвинута, але неврахування ефектів поляризації, що зумовлені різкою зміною діелектричної проникності на гетеромежах, приведе до неповного опису як електронних, діркових, так і донорних, акцепторних станів. Ефекти поляризації, що зумовлені йоном домішки, що розташований у центрі КТ, можна враховувати точно, розв'язуючи рівняння Шредінгера з відповідною потенціальною енергією, а потенціали самодії, як показано у [18-22, 33], можна враховувати за теорією збурень, що і зроблено у цій дисертації.

Більшість згаданих 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.

Незважаючи на велике число робіт, що присвячені дірковим та акцепторним станам у масивних кристалах і структурах з пониженою

розмірністю, актуальним залишається удосконалення багатозонної теорії діркових, екситонних і акцепторних станів у КТ. А враховуючи те, що кристали, які утворюють КТ, можуть сильно відрізнятися діелектричними проникностями, то важливо включити цей факт у теорію введенням потенціальних енергій взаємодії заряджених частинок (електронів, дірок, йонів домішок) з поляризаційними зарядами, появу яких і викликають ці частинки.

На даний час сучасні експериментальні методи дозволяють створювати багатошарові квантові точки як закритого, так і відкритого типу. Для сферично-симетричних багатошарових КТ з врахуванням простого параболічного закону дисперсії квазічастинок, методу S-матриці для відкритих КТ, моделі прямокутних сферично-симетричних потенціальних ям і бар'єрів одержано розв'язки відповідних рівнянь Шредінгера. У цих роботах визначено квазістаціонарні стани та середній час життя частинок у цих станах. Знайдено залежності енергетичних спектрів частинок від геометричних розмірів шарів наногетероструктури. Застосування отриманих розв'язків для електронів і дірок дозволило побудувати теорію екситонного спектра тришарової сферичної КТ, дослідити еволюцію екситонного спектра та енергію і час життя квазістаціонарних електронних станів у відкритих КТ.

Висновки до розділу 1

Літературний огляд випадку спрямований на огляд наявних наукових праць та досліджень, що стосуються властивостей водневоподібної домішки в структурах сферичних квантових точок. Дослідження цієї проблеми важливе з точки зору розуміння квантово-механічних особливостей та можливого застосування у сучасних технологіях, особливо в контексті квантової електроніки та нанотехнологій. Актуальність даної проблеми полягає у тому, що дослідження властивостей водневоподібної домішки в квантових точках може відкрити нові можливості для створення більш ефективних квантових пристроїв та матеріалів. Це може мати важливе значення для розвитку сучасних технологій, зокрема в області квантової обчислювальної та оптотехніки.

Таким чином домішки можуть значно змінити діркові, електронні і екситонні спектри у гетероструктурах, а звідси і вплинути на всі фізичні параметри гетеросистем.

РОЗДІЛ 2 ДОМІШКОВІ СТАНИ В НАПІВПРОВІДНИКОВИХ КРИСТАЛАМ. ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ.

2.1. Локалізований стан електрона в неідеальній ґратці.

Електричні властивості напівпровідників і в першу чергу, число носіїв струму у них в ряді випадків вагомо залежать від різних дефектів кристалічної ґратки. До числа таких дефектів ми відносимо: по-перше сторонні домішкові атоми, які можуть чи входять в ґратку, замінюючи один з основних атомів, чи знаходяться між вузлами ґратки; по-друге основні атоми ґратки, які перейшли у міжвузля; по-третє пусті (вакантні) вузли ґратки; по-четверте дислокації; по-п'яте поверхня кристалу і т.д. Кожне таке порушення ідеальної ґратки утворює додаткове поле яке впливає на електрон.

Розглянемо, наприклад атом миш'яку, маючи п'ять валентних електронів, поміщений в один з вузлів кристалічної ґратки кремнію. Чотири валентних електрони миш'яку подібно до чотирьох електронів атома кремнію будуть брати участь у чотирьох направлених валентних зв'язках ґратки. Можна рахувати, що п'ятий валентний електрон, слабше зв'язаний з вузлами кристалу, буде рухатися в полі ґратки і однозарядного іона миш'яку. В силу повільності зміни кулонівського потенціалу задачу можна вирішити використавши при цьому наближення ефективної маси. П'ятий електрон атома миш'яку, який не бере участь у валентних зв'язках кристалу, але забезпечує його нейтральність, може знаходитися, як у зв'язаному стані поблизу іона, так і у вільному стані у зоні провідності кремнію. Можна спробувати грубо врахувати вплив кристалу на кулонівське поле домішкового іона, враховуючи, що останній занурений в середовище з діелектричною сталою ϵ_0 . В такому випадку додаткове поле рівне:

$$U(r) = -e^2 / \epsilon_0 r \quad (2.1)$$

Для простої зони, коли енергія електрона $\varepsilon = \hbar^2 \kappa^2 / 2m^*$, тоді рівняння, яке описує дану систему, описується або зводиться до задачі про атом водню з масою електрона m^* і зарядом $e^* = \frac{e}{\sqrt{\varepsilon_0}}$. Якщо електрон знаходиться у зв'язаному стані поблизу домішкового іона то його енергія:

$$\varepsilon_i = \varepsilon = -\frac{m^*(e^*)^4}{2\hbar^2 n^2} = \frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} \frac{m^*}{m} \frac{1}{\varepsilon_0^2} = -\frac{13.5}{n^2} \left(\frac{m^*}{m}\right) \frac{1}{\varepsilon_0^2} \text{эВ}, \quad (2.2)$$

де n – головне квантове число і m – маса електрона у вакуумі.

Нижньому краю зони провідності відповідає енергія $\varepsilon_0 = 0$, тому від'ємні енергії електрона у зв'язаному стані (2.2) розміщені у забороненій зоні. Якщо домішковий іон розміщений в першому вузлі ґратки, то для основного квантового стану хвильова функція має вигляд:

$$f_0(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_B^3}} e^{-\frac{|r-a|}{a_B}}, \quad (2.3)$$

де борівський радіус

$$a_B = \frac{\hbar^2}{m^*(e^*)^2} = \frac{\hbar^2}{me^2} \left(\frac{m}{m^*}\right) \varepsilon_0 = 0.53 \left(\frac{m}{m^*}\right) \varepsilon_0 \text{А}. \quad (2.3a)$$

Підставивши вираз (2.3a) у (2.3) бачимо, що хвильова функція електрона $f_0(r)$ експоненціально затухає при віддалені від першого вузла, в якому знаходиться домішковий іон. У результаті збудження (теплого, світлового і т.д.) електрон може із зв'язаного стану, поблизу домішкового іона перейти у вільний – у зону провідності, в якій він перетворюється у носія електричного струму. Такі домішкові центри ,які у результаті збудження можуть постачати вільні заряди у зону провідності , називаються *донорами*.

Уявімо собі тепер атом елемента третьої групи (бор, алюміній, індій, чи галій) поміщений у один з пустих вузлів ґратки кремнію чи германію. У атомів третьої групи є три валентні електрона в s- і p-станах, і для того щоб

вони утворили чотиривалентний зв'язок у ґратці Si чи Ge їм необхідно позичити один електрон з «резервуара» валентних електронів основних атомів кристала. Таким чином у результаті теплового чи світлового збудження електрон з валентної зони кристала може приєднатися до нейтрального домішкового атома, створюючи від'ємний іон.

Домішкові центри, які при збудженні можуть захопити електрон з валентної зони, створюючи в ній позитивно заряджені дірки, називаються *акцепторами*.

Таким чином у результаті збудження донори перетворюються у позитивні іони, створюючи в зоні провідності вільні електрони, а акцептори – у негативні іони, створюючи у валентній зоні позитивно заряджені дірки.

З формули (2.2) легко оцінити, що для германію та кремнію енергії основного стану ($n=1$) для донорів чи акцепторів порядку 0.01 эв . Надто малі значення $|\varepsilon_0|$ пов'язані з великими значеннями діелектричної сталої для $Ge(\varepsilon_0 \approx 16)$ і $Si(\varepsilon_0 \approx 12)$. Такі рівні отримали назву *малих*, дійсно спостерігаються на досліді в германії та кремнії, коли домішкові атомами є елементи III і V груп періодичної системи.

В наступному розділі ми докладно розглянемо поведінку та спектр електронів в напівпровідниках донорного типу, розміри яких обмежені в просторі. Як ми побачимо в загальному випадку наявність гетерограниці, що являється характерною особливістю напівпровідників в заданій задачі, має значний вплив на енергетичний спектр системи.

2.2 Рух у полі центральної сили. Радіальне рівняння Шредінгера.

Дослідження в дипломній роботі присвячено знаходженню власних станів в домішкових напівпровідниках донорного типу, причому домішку донорного типу поміщено у центр сферичної квантової точки. Дана система володіє сферичною симетрією. Тому цікаво розглянути теорію руху частинки в центральному полі сил.

При дослідженні руху частинок у силових полях вирізняється важливий клас сферично-симетричних потенціалів, тобто потенціалів $U=U(r)$, які залежать лише від модуля радіус-вектора $r=|r|$. Наслідком центральної симетрії поля є те, що гамільтоніан частинки \hat{H} комутує з операторами квадрата моменту кількості руху \hat{L}^2 , його проекції \hat{L}_z та оператором інверсії \hat{I} . Це означає, що відповідні величини є інтегралами руху. Отже, $L^2 = h^2 l(l+1)$, $l=1,2,3,\dots$, $L_z = hm$, число m набуває $(2l+1)$ значень від $-l$ до $+l$. Крім того, ці оператори комутують між собою і, отже, мають спільну систему власних функцій.

Важливо в цьому місці зазначити, що в класичній механіці задача про рух двох взаємодіючих між собою частинок зводиться до проблеми одного тіла. Те ж маємо й у квантовій механіці. Нехай ми маємо дві частинки з координатами r_1 та r_2 , маси яких є m_1 та m_2 . Далі нехай потенціальна енергія взаємодії $U=U(|r_1 - r_2|)$ залежить лише від відстані між ними. Гамільтоніан такої системи

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{P}_2^2}{2m_2} + U(|r_1 - r_2|), \quad (2.4)$$

де оператори імпульсів $\hat{p}_1 = -i\hbar\nabla_1$, $\hat{p}_2 = -i\hbar\nabla_2$. Введемо нові змінні, а саме радіус-вектори центра мас та взаємної відстані:

$$R = \frac{m_1 r_1 + m_2 r_2}{m_1 + m_2}, \quad r = r_2 - r_1.$$

Перехід до нових змінних здійснюється стандартним чином. Наприклад,

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial X}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial x},$$

Де X – компонента радіус-вектора R , а x – компонента вектора r . Аналогічно діємо й для інших компонент градієнта. У результаті маємо:

$$\nabla_1 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \nabla_R - \nabla,$$

$$\nabla_2 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \nabla_R + \nabla.$$

Тепер оператори імпульсів частинок

$$\hat{p}_1 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \hat{P} - \hat{p},$$

$$\hat{p}_2 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \hat{P} + \hat{p},$$

де $\hat{P} = -i\hbar \nabla_R$ – оператор імпульсу центра мас, $\hat{p} = -i\hbar \nabla$ – оператор імпульсу відносного руху частинок. Підставляючи ці вирази в гамільтоніан, знаходимо

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r),$$

де повна маса системи

$$M = m_1 + m_2,$$

а величину m , що визначається з рівняння

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2},$$

називають зведеною масою. Отже, гамільтоніан складається із суми двох незалежних частин. Перший доданок є оператор кінетичної енергії системи як цілого й описує вільний рух системи центра мас з хвильовою функцією вільної частинки

$$\varphi_p(R) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{ipR/\hbar},$$

де p – повний імпульс системи. Два інші доданки описують відносний рух частинок із хвильовою функцією $\varphi(r)$. Повна хвильова функція є їхнім добутком:

$$\psi(R, r) = \varphi_p(R)\varphi(r).$$

Підстановка цього виразу в стаціонарне рівняння Шредінгера

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

приводить до рівняння для однієї частинки маси m з координатою r , що рухається в полі $U=U(r)$:

$$\left\{ \frac{\hat{P}^2}{2m} + U(r) \right\} \psi(r) = E' \psi(r),$$

де $E' = E - P^2/2M$ – енергія відносного руху частинок. Як бачимо, це рівняння збігається з рівнянням Шредінгера для однієї частинки маси m з координатою r у полі центральної сили з потенціальною енергією $U(r)$. Тобто проблема двох тіл і у квантовій механіці зводиться до проблеми одного тіла.

У рівнянні Шредінгера

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \right\} \psi(r) = E\psi(r),$$

внаслідок сферичної симетрії потенціалу, зручно перейти від декартових координат x, y, z до сферичних координат r, θ, φ за відомими правилами. Випишемо в нових координатах вираз для Лапласіана $\Delta = \nabla^2$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right].$$

Легко побачити, що вираз у квадратних дужках із точністю до множника $(-\hbar^2)$ є не що інше, як оператор квадрата моменту кількості руху \hat{L}^2 у сферичних координатах. Тепер рівняння Шредінгера запишеться так:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + U(r) \right\} \psi(r) = E\psi(r).$$

Змінні в рівнянні розділяються, і, відповідно до цього, хвильові функції зображаються як добуток функції $R(r)$, яка залежить лише від r , на хвильову функцію $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$, що залежить лише від кутових змінних і є власною функцією операторів \hat{L}^2 та \hat{L}_z :

$$\psi(r) = R(r)Y_{l,m}(\theta, \varphi).$$

Функцію $R=R(r)$ називають радіальною функцією, для якої отримуємо рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (rR) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} R + U(r)R = ER.$$

Це рівняння називають радіальним рівнянням Шредінгера. Видно, що воно не містить власних значень $L_z = \hbar m$, отже, енергія не залежить від квантового числа m і ми маємо $(2l+1)$ -кратне виродження енергетичних рівнів.

Сам вигляд рівняння підказують нам підстановку

$$rR(r) = \chi(r).$$

Для функції $\chi = \chi(r)$ отримуємо одновимірне рівняння Шредінгера

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + U_l(r) \right\} \chi = E\chi$$

з ефективною потенціальною енергією

$$U_l(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

за умови, що $0 \leq r < \infty$. Другий доданок у цьому виразі – відцентрова енергія, яка має відштовхувальний характер і не дозволяє частинці впасти на силовий центр.

Дослідимо поведінку функції χ на малих та великих відстанях. Почнемо з випадку $r \rightarrow 0$ і прийнемо, що при цьому $r^2 U \rightarrow 0$. Залишаючи в рівнянні для χ ведучі доданки, маємо

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1) \chi = 0.$$

Шукаємо функцію χ у вигляді $\chi = \text{const} \times r^k$. Будемо вимагати, щоб $R = \chi/r \rightarrow 0$ при $r \rightarrow 0$. Рівняння для показника k

$$-k(k-1) + l(l+1) = 0$$

дає два розв'язки $k = -l$ та $k = l+1$. Перший розв'язок не фізичний – радіальна функція безмежно зростає при наближенні до початку координат (частинка “падає” на центр). Отже залишається лише друге значення $k = l+1$:

$$\chi = \text{const} \times r^{l+1}, \quad r \rightarrow 0.$$

Нехай тепер $r \rightarrow \infty$. Залишаємо в рівнянні для χ головні члени:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi}{dr^2} = E\chi.$$

Розв'язок цього рівняння шукаємо у вигляді

$$\chi \sim e^{\alpha r}, \quad r \rightarrow \infty.$$

У результаті

$$\alpha = \pm \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Якщо $E > 0$, маємо інфінітний рух з неперервними значеннями енергії. Величина α є уявною, тобто

$$\alpha = \pm i \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},$$

і хвильова функція має осциляційний характер. Знак "плюс" відповідає сферичній хвилі, що поширюється від центра, знак "мінус" – хвилі, що збігається до центра.

Для зв'язаних станів $E < 0$, щоб забезпечити умову $R \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$, залишаємо одне значення

$$\alpha = -\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}.$$

У результаті

$$\chi \sim \exp\left[-r \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}\right].$$

Отже, для зв'язаних станів з урахуванням поведінки функції χ на малих та великих відстанях радіальну функцію записуємо у вигляді:

$$R(r) = r^l e^{-l} \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \omega(r).$$

Такий запис забезпечує необхідну поведінку функції R на границях області значень r , $0 \leq r < \infty$. Функція $\omega(r)$ відповідає за характер радіальної функції в областях проміжних значень r , який, зрозуміло, диктується конкретним виглядом потенціальної енергії $U=U(r)$.

2.3 Рух у полі центральної сили. Атом водню.

В попередньому параграфі було показано, що характер радіальної функції диктується конкретним виглядом потенціальної енергії $U=U(r)$.

Розглянемо рух електронів у кулонівському полі атомного ядра. Нехай заряд ядра дорівнює $Z|e|$ і потенціальна енергія електрона

$$U = -\frac{Ze^2}{r}.$$

У випадку $Z=1$ маємо модель атома водню. Нас буде цікавити атом водню, для якого радіальне рівняння

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1) - \frac{e^2}{r} \right\} \chi = E\chi.$$

Випадок довільного Z реалізуємо в остаточних виразах формальною заміною e на $e\sqrt{Z}$.

Введемо замість змінної r безрозмірну змінну

$$\rho = \frac{r}{a},$$

де a – деяка, характерна для цієї задачі, довжина, яку підбираємо з міркувань зручності. Тепер радіальне рівняння запишеться так:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{e^2}{a} \frac{1}{\rho} \right] \chi = E\chi,$$

або

$$\left[-\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{2mae^2}{\hbar^2} \frac{1}{\rho} \right] \chi = \frac{E}{\hbar^2/2ma^2} \chi.$$

Підберемо масштабну довжину a так, щоб $mae^2/\hbar^2 = 1$, і отримаємо, що $a = a_B$, де так званий “борівський радіус”

$$a_B = \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

Цим ми фіксуємо також характерний масштаб виміру енергії

$$\frac{\hbar^2}{2ma^2} = \frac{me^4}{2\hbar^2},$$

який називають ридбергом: $R_y = me^4/2\hbar^2$. Чисельно ці величини дорівнюють:

$$a_B = 0.529 \text{ \AA}, \quad R_y = 13.6 \text{ eV}$$

Таким чином, безрозмірне рівняння Шредінгера для атома водню має вигляд:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} \right] \chi = \varepsilon \chi,$$

$$\varepsilon = -\frac{E}{\hbar^2/2ma^2} = -\frac{E}{me^4/2\hbar^2},$$

$$\chi(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho\sqrt{\varepsilon}} \omega(\rho).$$

Знаходимо рівняння для невідомої функції ω :

$$x\omega''(x) + [2(l+1) - x]\omega'(x) + [1/\sqrt{\varepsilon} - (l+1)]\omega(x) = 0,$$

Розв'язавши дане рівняння, ми отримаємо остаточний вигляд хвильової функції масивного напівпровідникового кристалу, а отже задача вважається розв'язаною.

Висновки до розділу 2

Домішкові стани в напівпровідникових кристалах є ключовим аспектом їхньої фізичної природи та важливими з погляду їхнього застосування в електроніці. Домішкові атоми в кристалі вносять додаткові енергетичні рівні, які можуть бути заповнені електронами або дірками, утворюючи дефекти. Теоретичні основи полягають у розрахунках та моделюванні властивостей домішкових станів, таких як їхня енергія та електронні властивості. Важливим є також вивчення впливу домішкових станів на провідність та оптичні характеристики напівпровідникових кристалів.

Домішкові стани відіграють значущу роль у формуванні електронної та оптичної структури напівпровідникових кристалів.

Теоретичні розрахунки та моделювання є необхідними для розуміння та передбачення властивостей домішкових станів та їхнього впливу на властивості кристалів.

Вивчення домішкових станів є ключовим для розробки нових технологій та матеріалів у сфері напівпровідникової електроніки.

РОЗДІЛ 3 ДОМІШКОВІ СТАНИ В НАПІВПРОВІДНИКОВИХ КРИСТАЛАМ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ. АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ.

3.1 Модель сферичної квантової точки з скінченим розривом зон.

У попередніх параграфах розглянуто спектр донорної домішки поміщеної в центр сферичної наноструктури в моделі нескінченної потенціальної ями, більш реалістичною є модель з скінченим розривом зон.

Розглянемо напівпровідник сферичної форми з радіусом a та діелектричною проникністю ε_1 в якій поміщено домішку донорного типу. Мікрокристал поміщений в середовище з діелектричною проникністю ε_2 . Схематично дана система зображена на рис.1

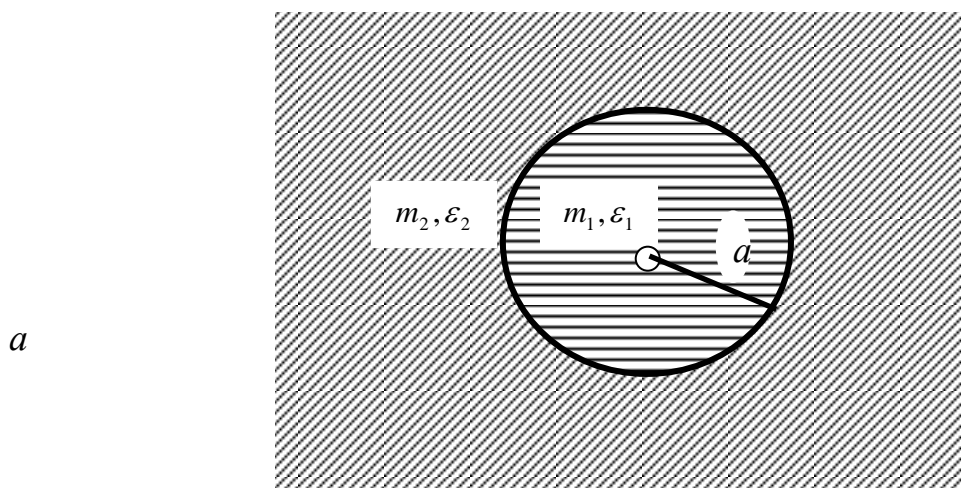


Рис.3.1. Схематичне зображення моделі квантової системи.

Радіальне рівняння Шредінгера згідно вище розглянутих параграфів, запишеться у наступному вигляді:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{L(L+1)}{r^2} R + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - V(r)) R = 0 \quad (3.1)$$

де

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{e^2}{\varepsilon r}, & r > a \\ -|V_0| - \frac{e^2}{\varepsilon r}, & r \leq a \end{cases} \quad (3.2)$$

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} \quad (3.3)$$

Зобразимо формулу (2) для наглядності схематично у вигляді графіка:

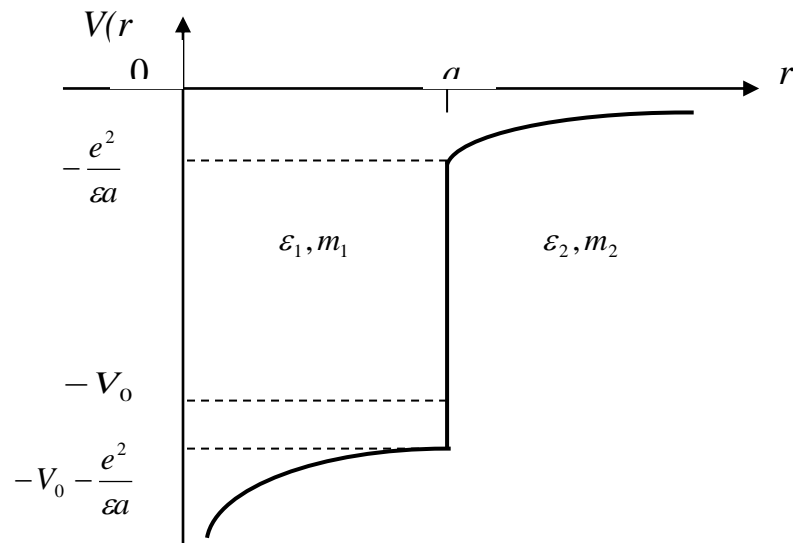


Рис.3.2. Схематичне зображення потенціальної енергії частинки

Згідно рис.3.2 видно, що радіальне рівняння Шредінгера (1) буде мати різний вигляд в залежності від областей в яких проводиться обчислення (області відмічені штрихами).

Розглянемо першу область:

$$E < -V_0 - \frac{e^2}{\varepsilon a}. \quad (3.4)$$

рівняння (3.1) в залежності від області розгляду, тобто для різних r приймуть вигляд

$$\begin{cases} \frac{d^2 R_1}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_1}{dr} - \frac{L(L+1)}{r^2} R_1 + \frac{2m_1}{\hbar^2} \left(E + |V_0| + \frac{e^2}{\varepsilon r} \right) R_1 = 0, r \leq a \\ \frac{d^2 R_2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_2}{dr} - \frac{L(L+1)}{r^2} R_2 + \frac{2m_2}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{\varepsilon r} \right) R_2 = 0, r > a \end{cases} \quad (3.5)$$

Щоб звести рівняння (3.5) до стандартного вигляду, тобто вигляд при якому енергія, яку необхідно обчислити, матиме вигляд аналогічний як у масивному кристалі введемо енергію наступним чином:

$$E = -V_0 - \frac{e^2}{\varepsilon a} + W_1,$$

де

$$W_1 \leq 0, \quad (3.6)$$

тоді

$$E = -V_0 - \frac{e^2}{\varepsilon a} - |W_1|, \quad |W_1| \geq 0.$$

Враховавши (3.6), рівняння (3.5) приймуть вигляд:

$$\begin{cases} \frac{d^2 R_1}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_1}{dr} - \frac{L(L+1)}{r^2} R_1 + \frac{2m_1}{\hbar^2} \left(-|W_1| - \frac{e^2}{\varepsilon a} + \frac{e^2}{\varepsilon r} \right) R_1 = 0, r \leq a \\ \frac{d^2 R_2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_2}{dr} - \frac{L(L+1)}{r^2} R_2 + \frac{2m_2}{\hbar^2} \left(-V_0 - \frac{e^2}{\varepsilon a} - |W_1| + \frac{e^2}{\varepsilon r} \right) R_2 = 0, r > a \end{cases} \quad (3.7)$$

В системі рівнянь (3.7) зручно для подальших обчислень перейти до безрозмірних величин:

$$a = \tilde{a} \frac{a_0}{\pi}, \quad r = \tilde{r} \frac{a_0}{\pi}, \quad (3.8)$$

де $a_0 = \frac{\hbar^2 \varepsilon}{m_1 e^2}$, підставивши в формулу (3.7) рівняння (3.8) та поділивши на $\frac{\pi^2}{a_0^2}$

отримаємо:

$$\begin{cases} \frac{d^2 R_1}{d\tilde{r}^2} + \frac{2}{\tilde{r}} \frac{dR_1}{d\tilde{r}} - \frac{L(L+1)}{\tilde{r}^2} R_1 + \left[-\frac{2m_1}{\hbar^2} \frac{a_0^2}{\pi^2} |W_1| - \frac{2}{\pi} \left(-\frac{1}{\tilde{a}} + \frac{1}{\tilde{r}} \right) \right] R_1 = 0, \tilde{r} \leq \tilde{a} \\ \frac{d^2 R_2}{d\tilde{r}^2} + \frac{2}{\tilde{r}} \frac{dR_2}{d\tilde{r}} - \frac{L(L+1)}{\tilde{r}^2} R_2 + \left[-(V_0 + |W_2|) \frac{2m_2}{\hbar^2} \frac{a_0^2}{\pi^2} + \frac{2}{\pi} \left(-\frac{1}{\tilde{a}} + \frac{1}{\tilde{r}} \right) \right] R_2 = 0, \tilde{r} > \tilde{a} \end{cases} \quad (3.9)$$

Введемо в (3.9) наступні позначення:

$$k^2 = \frac{2m_1}{\hbar^2} |W_1|, \quad \chi^2 = (|V_0| + |W_2|) \frac{2m_2}{\hbar^2}, \quad (3.10)$$

і безрозмірні величини

$$k = \tilde{k} \frac{\pi}{a_0}, \quad \chi = \tilde{\chi} \frac{\pi}{a_0} \quad (11)$$

Безрозмірні рівняння (3.9) матимуть вигляд:

$$\begin{cases} \frac{d^2 R_1}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_1}{dr} - \frac{L(L+1)}{r^2} R_1 + \left[-k^2 + C_1 \left(-\frac{1}{a} + \frac{1}{r} \right) \right] R_1 = 0, r \leq a \\ \frac{d^2 R_2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_2}{dr} - \frac{L(L+1)}{r^2} R_2 + \left[-\chi^2 + C_2 \left(-\frac{1}{a} + \frac{1}{r} \right) \right] R_2 = 0, r > a \end{cases}, \quad (3.12)$$

де

$$k^2 = \frac{2m_1 a_0^2}{\pi^2 \hbar^2} |W_1|, \quad \chi^2 = \frac{2m_2 a_0^2}{\hbar^2 \pi^2} (|V_0| + |W_2|), \quad C_1 = \frac{2}{\pi}, \quad C_2 = \frac{2}{\pi} \frac{m_2}{m_1}, \quad (3.13)$$

Розглянемо другу область (див. рис.3.2)

$$-V_0 - \frac{e^2}{\varepsilon a} \leq E \leq -\frac{e^2}{\varepsilon a} \quad (3.14)$$

Аналогічно до процедури викладеної раніше, вводимо енергію:

$$E = -\frac{e^2}{\varepsilon a} + W_2 = -\frac{e^2}{\varepsilon a} - |W_2| \quad (3.15)$$

тоді межі зміни енергії $|W_2|$:

$$-V_0 - \frac{e^2}{\varepsilon a} \leq -\frac{e^2}{\varepsilon a} + W_2 \leq -\frac{e^2}{\varepsilon a}$$

$$-V_0 \leq W_2 \leq 0 \quad (3.16)$$

$$0 \leq |W_2| \leq V_0$$

Рівняння (3.5), після введення перепозначень, матимуть вигляд:

$$\begin{cases} \frac{d^2 R_1}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_1}{dr} - \frac{L(L+1)}{r^2} R_1 + \frac{2m_1}{\hbar^2} \left(-\frac{e^2}{\varepsilon a} - |W_2| + |V_0| + \frac{e^2}{\varepsilon r} \right) R_1 = a, r \leq a \\ \frac{d^2 R_2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_2}{dr} - \frac{L(L+1)}{r^2} R_2 + \frac{2m_2}{\hbar^2} \left(-\frac{e^2}{\varepsilon a} - |W_2| + \frac{e^2}{\varepsilon r} \right) R_2 = a, r > a \end{cases} \quad (3.17)$$

Після введення безрозмірних величин (3.8), (3.11) рівняння (3.17) приймуть вигляд :

$$\begin{cases} \frac{1}{a_0^2} \frac{d^2 R_1}{d\tilde{r}^2} + \frac{1}{a_0^2} \frac{2}{\tilde{r}} \frac{dR_1}{d\tilde{r}} - \frac{L(L+1)}{\tilde{r}^2} R_1 + \frac{1}{a_0^2} + \frac{2m_1}{\hbar^2} \left(|V_0| - |W_2| + \frac{e^2}{\varepsilon a_0} \left(-\frac{1}{a} + \frac{1}{r} \right) \right) R_1 = 0, \tilde{r} \leq \tilde{a} \\ \frac{d^2 R_2}{d\tilde{r}^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_2}{d\tilde{r}} - \frac{L(L+1)}{\tilde{r}^2} R_2 + \frac{2m_2 a_0^2}{\hbar^2} \left(-|W_2| + \frac{e^2}{\varepsilon a_0} \left(-\frac{1}{\tilde{a}} + \frac{1}{\tilde{r}} \right) \right) R_2 = 0, \tilde{r} > \tilde{a} \end{cases}, \quad (3.18)$$

Якщо, як і раніше, ввести позначення

$$\chi_1^2 = \frac{2m_1}{\hbar^2} \frac{a_0^2}{\pi^2} (|V_0| - |W_2|), \quad \chi_1^2 = \frac{2m_1}{\hbar^2} \frac{a_0^2}{\pi^2} (|V_0| - |W_2|), \quad k_1^2 = \frac{2m_2}{\hbar^2} \frac{a_0^2}{\pi^2} |W_2|, \quad (3.19)$$

отримаємо рівняння в остаточному вигляді

$$\begin{cases} \frac{d^2 R_1}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_1}{dr} - \frac{L(L+1)}{r^2} R_1 + \left[\chi_1^2 + k_1 \left(-\frac{1}{a} + \frac{1}{r} \right) \right] R_1, r \leq a \\ \frac{d^2 R_2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_2}{dr} - \frac{L(L+1)}{r^2} R_2 + \left[-k_1^2 + k_2 \left(-\frac{1}{a} + \frac{1}{r} \right) \right] R_2, r > a \end{cases} \quad (3.20)$$

$$\begin{cases} \frac{d^2 R_1}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_1}{dr} - \frac{L(L+1)}{r^2} R_1 + \left[\chi_1^2 + J_1 \left(-\frac{1}{a} + \frac{1}{r} \right) \right] R_1 = 0, r \leq a \\ \frac{d^2 R_2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_2}{dr} - \frac{L(L+1)}{r^2} R_2 + \left[-k_1^2 + J_2 \left(-\frac{1}{a} + \frac{1}{r} \right) \right] R_2 = 0, r > a \end{cases}$$

Безрозмірні величини

$$\frac{2m_1}{\hbar^2} \frac{a_0^2}{\pi^2} |W|$$

3.2. Аналіз результатів

У зовнішній області $r > a$ також одержано радіальне рівняння:

$$-\frac{1}{2m_2^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_2(r) - \frac{1}{\varepsilon_2 r} R_2(r) - \tilde{E}_2 R_2(r) = 0,$$

де $\tilde{E}_2 = E - U_0$. З наступними позначеннями $\xi_2 = \alpha_2 r$, $(\alpha_2)^2 = -8m_2^* \tilde{E}_2$, $\lambda_2 = 2m_2^* / (\varepsilon_2 \alpha_2)$, $R_2(\xi_2) = g_2(\xi_2) / \xi_2$ знову одержано рівняння Віттекера, що за формою аналогічне до (3.10). Його скінченним розв'язком при $r \rightarrow \infty$ буде інша функція Віттекера:

$$g_2(\xi_2) = D_2 W_{\lambda_2, l+1/2}(\xi_2). \quad (3.30)$$

З граничних умов, яким задовольняють хвильові функції і потік густини ймовірності, одержано дисперсійне рівняння, з якого знайдено енергетичний спектр:

$$\left. \frac{\frac{1}{m_1^*} \frac{\partial}{\partial r} R_1(r)}{R_1(r)} \right|_{r=a} = \left. \frac{\frac{1}{m_2^*} \frac{\partial}{\partial r} R_2(r)}{R_2(r)} \right|_{r=a}. \quad (3.31)$$

Використовуючи граничні умови та умову нормування, знайдено невідомі коефіцієнти, а значить повністю визначено хвильові функції. Вплив потенціалу самодії враховано в першому порядку теорії збурень.

На рис.3.3 подано графіки залежності енергії основного стану електрона як за наявності домішки, так і при її відсутності у сферичній КТ гетероструктури Si/SiO_2 . Усі параметри кристалів подано в додатку (табл.А.1). На графіку зображено енергію основного стану електрона у сферичній КТ без домішки (крива 4). Видно, що збільшення радіуса КТ веде до плавної зміни енергії основного стану електрона. Також зображено

енергії основного стану донора у сферичній КТ, що обчислені з використанням середнього значення діелектричної проникності – крива 3, при нехтуванні величини (3.8) – крива 2 і з використанням повної потенціальної енергії $\Pi(r)$ – крива 1.

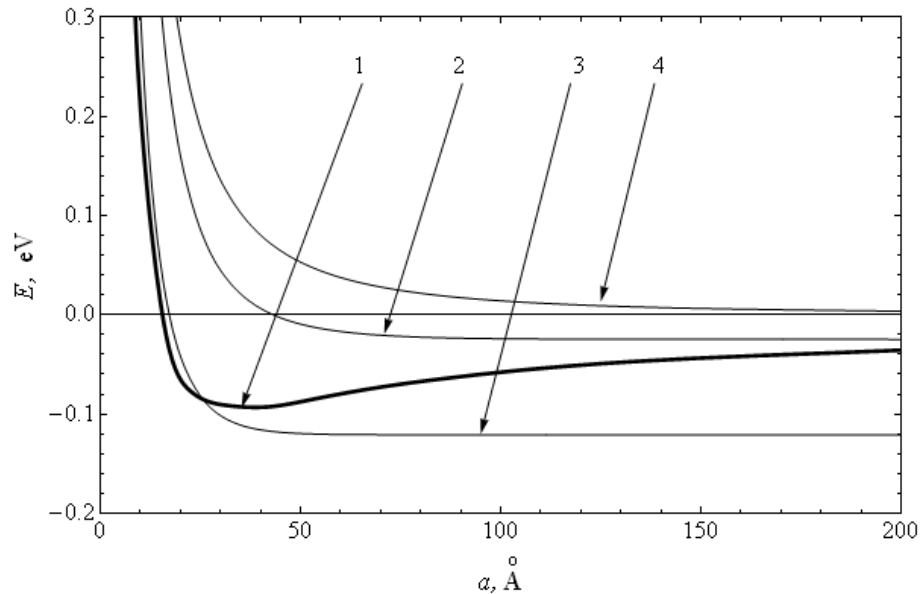


Рис.3.3. Енергія основного стану електрона у сферичній КТ гетероструктури Si/SiO₂. 1 – енергія, що послідовно визначена на основі вищеподаних розв'язків; 2 – енергія без врахування (3.8); 3 – енергія, що обчислена за умови $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 \equiv \varepsilon_c = \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2}$; 4 – енергія електрона без домішки.

З рисунка видно, що енергія донора при використанні середнього значення діелектричної проникності і повного врахування $\Pi(r)$ має близькі значення, якщо радіус КТ $a \approx 25 \text{ \AA}$. Якщо радіус КТ є більшим за 50 \AA , то різниця між енергіями при збільшенні радіуса зростає. При великих радіусах КТ, використовуючи ε_c , енергія прямує до величини, що дорівнює енергії водневоподібної атома, яка визначається ефективною енергією Рідберга $E = -13.6 m_1^* / \varepsilon_c^2 \text{ eV}$. Обчислення показали, що різниця між енергіями основного стану, що обчислена з використанням ε_c і повної потенціальної

енергії, прямує по абсолютній величині до значення $13.6m_1^*(1/\varepsilon_c^2 - 1/\varepsilon_1^2)$ eV для великих радіусів КТ. Такий результат зумовлений нескінченно малим впливом гетеромержі на енергію електрона. Для гетероструктур, у яких діелектричні проникності КТ і матриці значно відрізняються, згадана різниця є суттєвою.

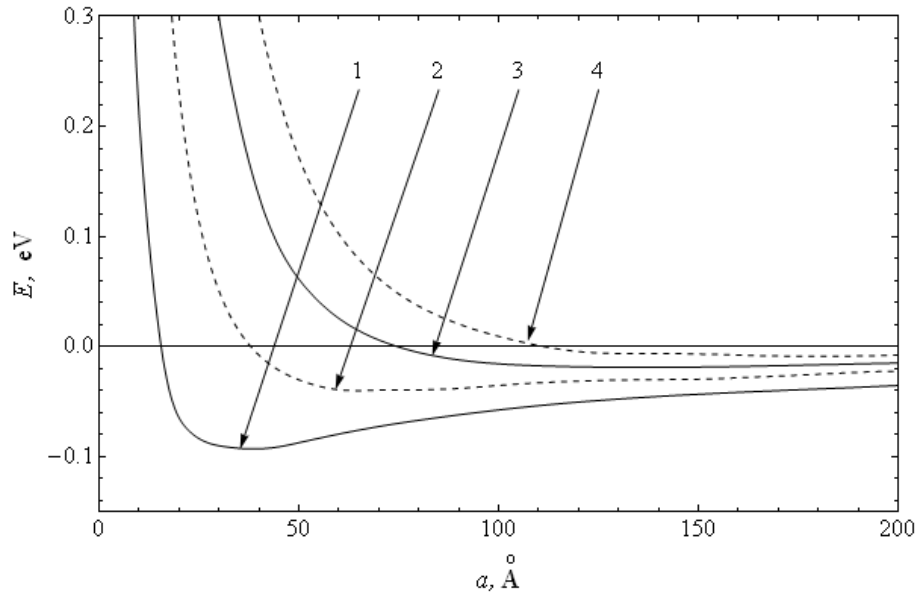


Рис.3.4. Енергія $E_{n,l}$ s - (суцільні криві) та p- (штрихові криві) станів електрона водневоподібної домішки у сферичній КТ наногетероструктури Si/SiO₂. 1 – 1s-стан, 2 – 1p-стан, 3 – 2s-стан, 4 – 2p-стан.

Крім основного стану донора у сферичній КТ обчислено і збуджені стани. Результати обчислень зображено на рис.3.4. Розв'язки при сталому орбітальному квантовому числі l пронумеровано квантовими числами n . Одержаний порядок квантових рівнів відповідає тим, що обчислювались у роботах [11-12, 15-16]. Проте врахування точного розв'язку рівняння Пуассона для потенціальної енергії взаємодії електрона дає можливість виявити важливу особливість залежності двох нижчих енергетичних станів від радіуса КТ – наявність немонотонної зміни енергії. Виявлено мінімум енергії при $a \approx 30 \text{ \AA}$ для 1s- і при $a \approx 65 \text{ \AA}$ для 1p-стану. Для вищих станів ці

мінімуми менш чітко виражені. Наявність такої особливості можна пояснити конкуруванням двох факторів: просторового обмеження, яке збільшує енергію, та її зменшенням внаслідок наявності ефективної потенціальної ями $U^*(a)$, яка для даної гетеросистеми входить в (3.7) з від'ємним знаком. Аналіз показав, що саме врахування поляризаційних зарядів на гетеромежах приводить до цих якісних та кількісних змін енергії домішки порівняно з випадком нехтування поляризаційних зарядів.

3.3 Вивчення донорних станів як частини навчальних курсів з фізики.

Донорні стани в квантових точках відносяться до енергетичних рівнів, які можуть бути зайняті електронами, що походять від домішкових атомів або молекул. Домішкові атоми можуть внести додаткові електрони у систему, які впливають на енергетичну структуру квантової точки.

Знання донорних дозволяє більш точно визначати властивості наногетероструктур та передбачати їх можливості практичного застосування. Донорні стани можуть зсувати енергетичні рівні квантової точки, що впливає на її електронну та оптичну поведінку. Регулюючи кількість та положення донорних станів, можна впливати на оптичні, електронні та теплові характеристики квантової точки. Донорні стани дозволяють конструювати ефективні напівпровідникові пристрої, такі як транзистори, лазери та фотодетектори. Донорні стани можуть бути використані для збереження та обробки інформації в квантових обчисленнях, що важливо для майбутнього розвитку обчислювальної технології.

Ці аспекти вказують на важливість вивчення та розуміння донорних станів у квантових точках для подальшого розвитку сучасної фізики та технологій.

У сучасному фізичному освітньому контексті вивчення донорних станів у квантових точках є надзвичайно актуальним. Зростаюче використання квантових точок у високотехнологічних пристроях та пристосуваннях вимагає глибшого розуміння їхньої енергетичної структури. Донорні стани відіграють ключову роль у формуванні електронних та оптичних властивостей квантових точок, що є фундаментальними для розробки нових ефективних напівпровідникових пристроїв. Розширення наших знань у цій області сприятиме не лише розвитку фізичної науки, але й відкриє нові

можливості для інновацій та технологічного прогресу, що вплине на багато сфер сучасного життя.

Навчання стосовно дослідження донорних станів у квантових точках може бути спрощене та зрозуміле для студентів через різноманітні методи та форми роботи. Проведення лекцій з детальним поясненням теоретичних основ та важливих понять є ключовим елементом у формуванні загального розуміння теми. Теоретичні основи досить детально описані вище в магістерській роботі. Проведення лабораторних робіт та практичних занять, де студенти можуть спостерігати донорні стани у реальних експериментах, сприяє кращому засвоєнню матеріалу. Сучасні реалії вказують на те, що проведення лабораторних експериментів досить важко втілити в життя. Тому використання комп'ютерних програм для створення візуалізацій та моделювання донорних станів допомагає віртуалізувати абстрактні концепції та полегшує їх розуміння.

Організація дискусій та групових обговорень навколо питань, пов'язаних з донорними станами, стимулює активну участь студентів та розвиває їхні аналітичні та критичні навички. Задачі для самостійної роботи та проекти дозволяють студентам досліджувати певні аспекти донорних станів та використовувати здобуті знання в практичних ситуаціях. Регулярні контрольні роботи та тести сприяють відстеженню прогресу студентів та підсилюють їхню відповідальність за вивчення матеріалу.

Використання цих методів та форм сприяє кращому засвоєнню студентами матеріалу про донорні стани та сприяє їхньому успішному вивченню цієї складної теми.

Використання інноваційних підходів у викладанні та навчанні донорних станів в квантових точках дозволить з іншого боку подивитися на досить складну тему і спростити її розуміння.

Інноваційні підходи у викладанні та навчанні донорних станів в квантових точках можуть значно покращити процес засвоєння цієї складної теми. Розробка спеціальних VR (Віртуальна реальність) – симуляцій, які дозволяють студентам "зануритися" у світ квантових точок та спостерігати донорні стани у тривимірному середовищі. Створення навчальних мобільних додатків та комп'ютерних ігор, які дозволяють візуалізувати та експериментувати з донорними станами у цікавий та дочтупний спосіб.

Розробка електронних курсів з інтерактивними елементами та можливістю дистанційного навчання, а також публікація відкритих лекцій, які будуть доступні всім охочим. Організація партнерства з технологічними компаніями для надання студентам можливості працювати з реальними системами, пов'язаними з дослідженням донорних станів. Сприяння взаємодії між студентами, аспірантами та науковцями для обміну досвідом та знаннями, а також надання можливості звертатися до досвідчених менторів. Створення онлайн-спільнот, де студенти можуть обговорювати питання, пов'язані з донорними станами, ділитися власними дослідженнями та здобутими знаннями.

Ці інноваційні підходи дозволять зробити навчання донорних станів більш цікавим, доступним та ефективним для студентів, сприяючи глибшому розумінню та застосуванню цієї складної теми.

Вивчення донорних станів у квантових точках є важливою складовою сучасної фізичної науки та освіти. Основні висновки з цієї теми включають наступне:

Донорні стани у квантових точках відіграють важливу роль у формуванні їхніх енергетичних властивостей та спектральних характеристик. Розуміння цих станів є ключовим для подальших досліджень та розробки нових технологій.

Вивчення донорних станів надає студентам унікальну можливість поглибленого вивчення квантової фізики та наноматеріалознавства. Це дозволяє майбутнім фахівцям отримати важливі навички для подальших наукових та технологічних викликів.

Активні наукові дослідження донорних станів у квантових точках відкривають нові можливості для розробки квантових пристроїв, фотоелектроніки, оптоелектроніки та квантових обчислень.

Загальною висновком є те, що вивчення та дослідження донорних станів у квантових точках є актуальним та важливим напрямком сучасної фізичної освіти та науки, який має велике практичне значення для розвитку сучасних технологій.

Висновки до розділу 3

Шляхом послідовного врахування поляризації визначено енергетичні спектри домішкового електрона у сферичній КТ. Одержані результати показали якісну та кількісну відмінність від відповідних результатів без врахування поляризаційних зарядів.

Встановлено, що для КТ, в якій діелектричні проникності сильно відрізняються, енергії квантових рівнів при великих радіусах відрізнятимуться від енергій з використанням ε_c на величину $13.6 m_1^* (1/\varepsilon_c^2 - 1/\varepsilon_1^2) / (n+l)^2$ eV. А для малих радіусів КТ, де вже важливу роль відіграє гетерогежа, одержано немонотонну зміну енергії домішкового електрона у КТ.

ВИСНОВКИ

Магістерську роботу присвячено дослідженню сферичних наногетеросистем з домішками (донорними) в межах однозонної моделі, коли зону провідності можна апроксимувати простим параболічним законом дисперсії, одержати хвильове рівняння Шредінгера з ізотропною ефективною масою.

Розв'язки задачі про водневоподібну донорну домішку у центрі сферичної одношарової подано за допомогою функції Віттекера та Кулона. На основі стандартних граничних умов та умови нормування знайдено енергетичний спектр домішки.

Врахування повної потенціальної енергії виявило в результатах якісну відмінність в залежності $E(a)$ порівняно з наближеннями, в яких діелектричні проникності однакові чи коли відкинути доданок $U^*(a)$ з потенціальної енергії. Наявність мінімуму при зменшенні a зумовлено конкуренцією двох факторів: просторового обмеження, що збільшує енергію, та ростом потенціальної енергії, що її зменшує.

Для основного стану мінімум чіткий, а для збуджених станів зменшується.

Домішки також можуть впливати на електрон-діркові спектри у квантовій точці. Досліджено вплив позитивно (негативно) зарядженої домішки на електрон-діркові спектри. Аналіз показує, що енергія електрон-діркової системи в основному визначається ефектом розмірного квантування та кулонівською взаємодією між зарядами, яка залежить від відстаней між ними.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Cho A.Y. Growth of Periodic Structures by the Molecular-Beam Method / A.Y. Cho // *Appl. Phys. Lett.* – 1971. – Vol. 19, № 11. – P. 467-468.
2. Goldstein L. Growth by molecular beam epitaxy and characterization of InAs/GaAs strained-layer superlattices / L. Goldstein, F. Glas, J.Y. Marzin [et al.] // *Appl. Phys. Lett.* – 1985. – Vol. 47, № 10. – P. 1099-1101.
3. Bastard G. Hydrogenic impurity states in quantum well: A simple mode / G. Bastard // *Phys. Rev. B.* – 1981. – Vol. 24, № 8. – P. 4714-4722.
4. Bryant G.W. Hydrogenic impurity states in quantum-well wires / G.W. Bryant // *Phys. Rev. B.* – 1984. – Vol. 29, № 12. – P. 6632-6639.
5. Chu D.S. Hydrogenic impurity states in quantum dots and wires / D.S. Chu, C.M. Hsiao, and W.N. Mei // *Phys. Rev. B.* – 1992. – Vol. 46, № 7. – P. 3898-3905.
6. Zhu J.-L. Exact solution of hydrogenic donor states in a spherically rectangular quantum well / J.-L. Zhu // *Phys. Rev. B.* – 1989. – Vol. 39, № 12. – P. 8780-8783.
7. Zhu J.-L. Confined electron and hydrogenic donor states in a spherical quantum dot of GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs / J.-L. Zhu, J.-J. Xiong, B.-L. Gu // *Phys. Rev. B.* – 1990. – Vol. 41, № 9. – P. 6001-6007.
8. Riberio F.J. Impurities in a quantum dot: A comparative study / F.J. Riberio, A. Latge // *Phys. Rev. B.* – 1994. – Vol. 50, № 7. – P. 4913-4916.
9. Zhu J.-L. Spectrum and binding energy of an off-center donor in a spherical quantum dot / J.-L. Zhu, X. Chen // *Phys. Rev. B.* – 1994 Vol. 50, № 7. – P. 4497-4502.

10. Yang C.-C. Eigenstates and fine structure of a hydrogenic impurity in a spherical quantum dot / C.-C. Yang, L.-C. Liu, and S.-H. Chang // *Phys. Rev. B.* – 1998. – Vol. 58, № 4. – P. 1954-1961.
11. Ткач М.В. Спектр і хвильові функції водневоподібної домішки, розміщеної в центрі квантової точки / М.В. Ткач, В.А. Головацький, Я.М. Березовский // *Фіз. і хім. тверд. тіла.* – 2003. – Т. 4, № 2. – С. 213-220.
12. Boichuk V.I. Bound Energy of the Wannier Exciton in Similar Heterogeneous Double Structures / V.I. Boichuk, I.V. Bilynsky // *Phys. Stat. Sol.* – 1992. – Vol. 174, № 1. – P. 463-470.
13. Ткач Н.В. Спектр и взаимодействие электрона с инерционной и безынерционной поляризациями в сферической полупроводниковой гетеросистеме / Н.В. Ткач, В.И. Бойчук, О.Н. Войцеховская [и др.] // *ФТТ.* – 1996. – Т. 38, № 10. – С. 3161-3172.
14. Бойчук В.І. Дослідження впливу поляризації на енергію електрона, дірки сферичної наногетеросистеми напівпровідників (на прикладі структур Si/SiO_2 , β - HgS/CdS) / В.І. Бойчук, Р.Ю. Кубай, Г.М. Годованець [та ін.] // *ЖФД.* – 2006. – Т. 10, № 3. – С. 220-226.
15. Luttinger J.M. Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields / J.M. Luttinger, W. Kohn // *Phys. Rev. Vol.* – 1955. – Vol. 97, № 4. – P. 869-888.
16. Luttinger J.M. Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors: General theory / J.M. Luttinger // *Phys. Rev.* – 1956. – Vol. 102, № 4. – P. 1030-1041
17. Lipari Nunzio O. Angular Momentum Theory and Localized States in Solids. Investigation of Shallow Acceptor States in Semiconductors / Nunzio O. Lipari, A Baldereschi // *Phys. Rev. Lett.* – 1970. – Vol. 25, № 24. – P. 1660-1664.

18. 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.
19. Rodina A.V. General boundary conditions for the envelope function in the multiband *kp* model / A.V. Rodina, A.Yu. Alekseev, Al.L. Efros [and al.] // *Phys. Rev. B.* – 2002. – Vol. 65, № 12. – P. 125302-125314.
20. Boichuk V.I. Interband optical transitions in spherical nanoheterostructures / V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, I.O. Shakleina // *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics.* – 2005. – Vol. 8, № 4. – P. 26-32.
21. Moskalenko A.S. Single-particle states in spherical *Si/SiO₂* quantum dots / A.S Moskalenko, J. Berakdar, A.A. Prokofiev [and al.] // *Phys. Rev. B.* – 2007. – Vol. 76, № 8. – P. 085427-085436.
22. Бойчук В.І. Двозарядна домішка у сферичній квантовій точці / В.І. Бойчук, І.В. Білинський, Р.Я. Лешко // *Фізика і технологія тонких плівок та наносистем. Матеріали XI Міжнародної конференції у 2 т.: Тези доповідей. 7-12 травня 2007р.* – Івано-Франківськ, 2007. – Т.2. – С. 169-170.
23. Кубай Р.Ю. Вплив поверхневих зв'язаних зарядів на енергію екситона у сферичній наногетеросистемі типу *CdS/β-HgS/CdS* та *SiO₂/Si/SiO₂* / Р.Ю. Кубай, В.Б. Гольський, І.С. Шевчук, Р.Я. Лешко // *III-а Українська наукова конференція з фізики напівпровідників: Тези доповідей. 17-22 червня 2007р.* – Одеса, 2007. – Т. 1. – С. 248.
24. Лешко Р.Я. Енергетичний спектр нейтрального та негативно зарядженого донорів у сферичній квантовій точці / Р.Я. Лешко // *Всеукраїнська школа-семінар і конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини: Тези доповідей. 5-6 червня 2008.* – Львів, 2008, – с. 40.
25. Бойчук В.І. Енергія одновалентного та двовалентного донора у сферичній квантовій точці / В.І. Бойчук, І.В. Білинський, Р.Я. Лешко //

- Науковий вісник Чернівецького університету. – 2008. – Випуск 420.
Фізика. Електроніка. – С. 5-11.
26. Boichuk V.I. Ground and excited states of D^0 and D^- donors in a spherical quantum dot / V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, R.Ya. Leshko // Ukr. J. Phys. – 2008. – Vol. 53, № 10. – P. 991-996.
27. Boichuk V.I. The effect of polarization charges on energy of univalent and bivalent donors in a spherical quantum dot / V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, R.Ya Leshko // Condensed Matter Physics. – 2008. – Vol. 11, № 4. – P. 653-661.
28. Бойчук В.І. Властивості багатоелектронних сферичних квантових точок / В.І. Бойчук, І.В. Білинський, Р.Я. Лешко // Фіз. і хім. тверд. тіла. – 2009. – Т. 10, № 3. – С. 524-528.
29. Boichuk V.I. Hydrogenic impurity in a two-layer spherical quantum dot / V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, R.Ya. Leshko // Semiconductor physics, quantum electronics and optoelectronics. – 2009. – Vol. 12, № 2. – P. 155-161.
30. Бойчук В.І. Водневоподібна домішка у двошаровій сферичній квантовій точці / В.І. Бойчук, І.В. Білинський, Р.Я. Лешко // VI міжнародна школа-конференція „Актуальні проблеми фізики напівпровідників”: Тези доповідей. 23-26 вересня 2008. – Дрогобич, 2008. – С. 48.
31. Бойчук В.І. Дискретні та квазістаціонарні стани водневоподібної домішки у відкритій сферичній наногетеросистемі / В.І. Бойчук, І.В. Білинський, Р.Я. Лешко, Л.Я. Вороняк // ЖФД. – 2010. – Т. 14, №1. – С. 1702(1)-1702(8).
32. Boichuk V.I. Stationary and quasistationary states of hydrogenic impurity in a spherical quantum antidot / V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, R.Ya. Leshko, L.Ya. Voronyak // Ukr. J. Phys. – 2009. – Vol. 54, № 10. – P. 1021-1026.
33. Бойчук В.І. Дослідження енергетичного спектру акцепторної домішки у центрі сферичної наногетероструктури кристалів типу $GaSb/AlSb$ /

- В.І. Бойчук, І.В. Білинський, Р.Я. Лешко // Фізика і технологія тонких плівок та наносистем. Матеріали XII Міжнародної конференції у 2 т.: Тези доповідей. 18-23 травня 2009. – Івано-Франківськ, 2009. – Т. 1. – С. 29-30.
34. Бойчук В.І. Діркові та домішкові стани у сферичній наногетероструктурі кристалів типу *GaSb/AlSb* / В.І. Бойчук, І.В. Білинський, Р.Я. Лешко, Л.М. Турянська // IV Українська наукова конференція з фізики напівпровідників: Тези доповідей. 15-19 вересня 2009. – Запоріжжя, 2009. – Т. 2. – С. 94.
35. Boichuk V.I. Study of an acceptor impurity located at the center of a spherical nanoheterostructure / V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, R.Ya. Leshko, I.O. Shakleina // Ukr. J. Phys. – 2010. – Vol. 55, № 3. – P. 326-334.
36. Boichuk V.I. Hole, impurity and exciton states in a spherical quantum dot / V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, R.Ya. Leshko // Condensed Matter Physics. – 2010. – Vol. 13, № 1. – P. 13702(1)-13702(12).
37. Бойчук В.І. Спектр електрон-діркової пари у сферичній квантовій точці з зарядженою домішкою в її центрі / В.І. Бойчук, І.В. Білинський, Р.Я. Лешко // 4-а Міжнародна науково-технічна конференція „Сенсорна електроніка та мікросистемні технології“: Тези доповідей. 26 червня – 2 липня 2010 р. – Одеса, 2010. – С. 39.
38. Szafran B. Excitonic trions in single and double quantum dots / B. Szafran, B. Ste'be', J. Adamowski [and al.] // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 66, № 16. – P. 165331-165340.
39. Holovatskyi V.A. Electron energy spectrum in a spherical *HgS/CdS* quantum dot with a smooth bounding potential / V.A. Holovatskyi // Ukr. J. Phys. – 2006. – Vol. 51, № 2. – P. 207-210.
40. Bryant G.W. Hydrogenic impurity states in quantum-well wires: Shape effects / G.W. Bryant // Phys. Rev. B. – 1985. – Vol. 31, № 12. – P. 7812-7812.

41. Lampert M.A. Mobile and Immobile Effective-Mass-Particle Complexes in Nonmetallic Solids / M.A Lampert // Phys. Rev. Lett. – 1958. – Vol. 1, № 12. – P. 450-453.
42. Kheng K.T. Observation of negatively charged excitons X- in semiconductor quantum wells / K. Kheng, R.T. Cox, Y.M. d'Aubigne [and al.] // Phys. Rev. Lett. – 1993. – Vol. 71, № 11. – P. 1752-1755.
43. Esaki L. Semiconductor superfine structures by computer-controlled molecular beam epitaxy / L. Esaki, L.L. Chang // Thin Solid Films. – 1976. – Vol. 36, № 2. – P. 285-298.
44. Voisin P. Cyclotron resonance linewidth in selectively doped $GaAs - Al_xGa_{1-x}As$ heterojunctions / P. Voisin, Y. Guldner, J.P. Vieren [and al.] // Appl. Phys. Lett. – 1981. – Vol. 39, № 12. – P. 982-984.
45. Bastard G. Exciton binding energy in quantum wells / G. Bastard, E.E. Mendez, L.L. Chang [and al.] // Phys. Rev. B. – 1982. – Vol. 26, №4. – P. 1974-1979.

ДОДАТОК

Таблиця

кристал	a_0 , Å	$m_{e\perp}$, m_0	$m_{e\parallel}$, m_0	γ_1 , m_0	γ_2 , m_0	γ_3 , m_0	γ , m_0	ϵ	E_g , eV	χ , eV	Δ_{so} eV
Si	5.43 ^c	0.190 ^c	0.916 ^c	4.22 ^a	0.39 ^a	1.44 ^a	1.02 ^a	11.4 ^b	1.12 ^d	4.05 ^d	0.04 ^c
SiO ₂	5.40 ^c	1 ^d	1 ^d	5 ^e	-	-	0 ^e	2.4 ^c 3.8 ^b	8.62 ^d	0.85 ^d	-
β -HgS	5.58 ^c	0.036 ^h	0.036 ^h	-	-	-	-	11.4 ^h	0.50 ^h	4.9 ^h	-
CdS	5.82 ^c	0.200 ^h	0.200 ^h	-	-	-	-	5.5 ^h	2.50 ^h	3.7 ^h	-
GaSb	6.12 ^c	-	-	11.8 ^a	-	-	4.77 ^a	15.7 ^f	0.78 ⁱ	4.06 ⁱ	0.68 ^g
AlSb	6.13 ^c	-	-	4.15 ^a	-	-	1.45 ^a	12.0 ^f	1.61 ⁱ	3.64 ⁱ	0.76 ^g
CdSe	5.83 ^c	-	-	1.66 ⁿ	-	-	0.41 ⁿ	9.2 ⁿ	1.67 ^k	4.6 ^j	0.68 ^l
ZnSe	5.67 ^c	-	-	3.77 ^a	-	-	1.49 ^a	9.1 ^f	2.70 ^j	4.09 ^j	0.43 ^m

У таблиці відсутні ті параметри, які не використовуються для обчислень. χ – параметр, що, разом з величиною забороненої зони, визначає величину розриву зон гетероструктури.