

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
ПІВДЕННОУКРАЇНСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ ПЕДАГОГІЧНИЙ  
УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ К.Д. УШИНСЬКОГО

Кваліфікаційна наукова  
праця на правах рукопису

**КАРПИН**  
**ДМИТРО СТЕПАНОВИЧ**

УДК 538.9

**ДИСЕРТАЦІЯ**

**ВПЛИВ ГЕТЕРОМЕЖІ ТА ДОМШОК НА СТАНИ ТА  
ОПТИЧНИЙ СПЕКТР ПОГЛИНАННЯ КВАНТОВИХ ТОЧОК**

01.04.07 — фізика твердого тіла

Подається на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей,  
результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

\_\_\_\_\_ Д.С. Карпин

Науковий керівник:  
доктор фізико-математичних наук,  
професор, **Пелещак Роман Михайлович**

ОДЕСА – 2020

## АНОТАЦІЯ

**Карпин Д.С. Вплив гетеромежі та домішок на стани та оптичний спектр поглинання квантових точок.** – Кваліфікаційна наукова робота на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла – Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка. Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К.Д. Ушинського, 2020.

Дисертація присвячена теоретичному дослідженню впливу гетеромежі квантова точка-матриця та домішок донорного й акцепторного типів на електрон-діркові стани та оптичний спектр поглинання квантових точок.

Дослідження впливу домішок та поверхневих станів на гетеромежі квантова точка-матриця є важливим для створення нових приладів запису оптичної інформації з розширеним спектральним діапазоном у інфрачервону область, а також для конструювання ефективних детекторів мікрохвильового випромінювання та для методу електронної спектроскопії енергетичних рівнів у системах низької розмірності.

У межах чотиризонної моделі Латтінджера у наближенні Балдареші-Ліпарі розвинуто теорію розрахунку енергетичного спектру дірки від геометричного розташування двох іонів акцепторних домішок у сферичній квантовій точці CdSe/SiO<sub>2</sub>. Встановлено, що енергетичні рівні дірки розщеплюються при віддаленні домішок від центра квантової точки, що пов'язано з пониженням сферичної симетрії кристалічної ґратки квантової точки. Розраховано спектральний лінійний коефіцієнт поглинання світла, що зумовлене міжрівневими переходами дірки за наявності акцепторів, і показано його відмінності порівняно з донорними домішками.

Показано, що квантова точка CdS/SiO<sub>2</sub> з донорною домішкою, яка розміщена у її центрі, має поверхневі електронні стани, що спричинені домішкою. Визначено розміри квантової точки, за яких умов ймовірність

перебування електрона в околі гетеромежі квантова точка-матриця є найбільшою. Розраховано поверхневий поляризаційний потенціал, що виникає внаслідок взаємодії електрона з поляризаційними зарядами на гетеромежі квантова точка-матриця CdS/SiO<sub>2</sub>. Встановлено умови існування станів електрона у поверхневій поляризаційній пастці.

Обчислено коефіцієнт поглинання світла квантовою точкою CdS/SiO<sub>2</sub>, зумовлене міжрівневими переходами електрона за наявності донорної домішки у її центрі. Зокрема визначено залежність коефіцієнта поглинання світла квантовими точками з урахуванням їх дисперсії за розмірами від довжини хвилі при переходах електрона з об'ємного в об'ємний стан ( $1s \rightarrow 1p$ ) і з об'ємного у поверхневий ( $1s \rightarrow 2p$ ). Визначено максимальні значення коефіцієнта поглинання при цих переходах. Встановлено, що поглинання, яке пов'язано з переходом з об'ємного в об'ємний стан є значно більшим від поглинання, яке пов'язано з переходом з об'ємного у поверхневий стани.

Розглянуто квантові точки CdS у матриці SiO<sub>2</sub>, що містять екситон-домішкові комплекси: D<sup>+</sup>-X (позитивно заряджений іон донорної домішки D<sup>+</sup> та екситон X); A<sup>-</sup>-X (негативно заряджений іон акцепторної домішки A<sup>-</sup> та екситон X); D<sup>0</sup>-X (нейтральна донорна домішка D<sup>0</sup> та екситон X); A<sup>0</sup>-X (нейтральна акцепторна домішка A<sup>0</sup> та екситон X). Для кожного з них визначено енергію їхнього утворення. Отримані результати обчислень енергії порівняно з експериментальними даними і отримано якісне та кількісне узгодження даних.

Проведено розрахунок лінійного спектрального коефіцієнта поглинання світла зумовлене міжзонними переходами квазічастинок у квантових точках CdS/SiO<sub>2</sub> за наявності у них екситон-домішкових комплексів (D<sup>+</sup>-X, A<sup>-</sup>-X, D<sup>0</sup>-X, A<sup>0</sup>-X). При розрахунку враховано дисперсію за розмірами квантових точок. Визначено внесок кожного комплексу з сумарний коефіцієнт поглинання. Встановлено які саме комплекси спостерігалися експериментально шляхом співставлення обчислених кривих поглинання і експериментальних кривих

фотолюмінесценції. Отримано кількісне узгодження розташування максимумів обчисленого поглинання і експериментально визначеної фотолюмінесценції (з урахуванням зсуву Стокса).

Теоретично досліджено вплив електрон-деформаційної взаємодії на формування рівнів Тамма у квантових точках InAs гетеросистеми InAs/GaAs. Розраховано залежність електронних енергетичних рівнів Тамма від розміру квантової точки з урахуванням деформації гетеросистеми і без неї. Для цього з одного боку побудовано модель напруженої квантової точки як напівскінченного ланцюжка атомів (модель Кроніґа-Пені-Тамма) з урахуванням зміни сталої ґратки внаслідок деформації, яка у свою чергу залежить від розміру квантової точки. З другого боку квантову точку змодельовано континуумом у рамках теорії ефективної маси, моделі пружного середовища та моделі прямокутного потенціального бар'єру, що задає потенціал обмеження для електрона. Моделі узгоджено шляхом прирівняння енергетичних відстаней між першими дозволеними рівнями в обох моделях.

Встановлено, що внаслідок електрон-деформаційної взаємодії енергія електрона поверхневих рівнів Тамма на гетеромежі квантова точка-матриця (InAs/GaAs) зростає, тоді як у об'ємі квантової точки енергія електрона зменшується. Причиною зростання енергії поверхневих рівнів Тамма у квантовій точці InAs гетеросистеми InAs/GaAs є зменшення відстані між атомами внаслідок деформації. А зменшення енергії електрона в об'ємі квантовій точці зумовлено зміною ефективної глибини потенціальних ям внаслідок деформації квантової точки. Показано, що енергія поверхневого рівня Тамма з урахуванням деформації зростає при зменшенні розмірів квантової точки. Це узгоджується з даними інших робіт, в яких не враховано електрон-деформаційну взаємодію.

**Ключові слова:** донорна та акцепторна домішка, квантова точка, міжзонне і міжрівневе поглинання світла, поверхневі стани, поверхнева поляризаційна пастка.

## SUMMARY

Karpyn D.S. Influence of the heteroboundary and impurities on states and optical absorption spectrum of quantum dots. - Manuscript.

Thesis for the scientific degree of Candidate of Physical and Mathematical Sciences in specialty 01.04.07 – solid state physics - Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University. South Ukrainian National Pedagogical University named after K.D. Ushinsky, 2020.

The dissertation is devoted to the theoretical research of the influence of the quantum dot-matrix hetero boundary, donor and acceptor impurities on electron-hole states and the optical absorption spectrum of quantum dots.

The study of the influence of impurities and surface states on the quantum dot-matrix hetero boundary is important for the creation of new devices for recording optical information with extended spectral range in the infrared region, as well as for the design of efficient microwave detectors and low-level electron spectroscopy in the system.

Within the four-band Luttinger model in the Baldaresi-Lipari approximation, the theory of calculating the energy spectrum of a hole as the function of geometric arrangement of two acceptor impurities in the spherical quantum dot CdSe/SiO<sub>2</sub> was developed. It is established that the energy levels of the hole are split when impurities are removed from the center of the quantum dot, which is associated with a decrease in the spherical symmetry of the crystal lattice of the quantum dot. The spectral linear light absorption coefficient due to interlevel transitions of the hole in the presence of acceptors is calculated, and its differences in comparison with donor impurities are shown.

It is shown that the CdS/SiO<sub>2</sub> quantum dot with a donor impurity, which is located in its center, has surface electronic states caused by the impurity. Sizes of the quantum dot are determined, under which conditions the probability of an electron staying in the vicinity of the hetero boundary of the quantum dot-matrix is the highest. The surface polarization potential arising from the interaction of an electron

with polarization charges on the heterometric quantum dot-matrix CdS/SiO<sub>2</sub> is calculated. The conditions for the existence of electron states in the surface polarization trap are established.

The coefficient of light absorption by the quantum dot CdS/SiO<sub>2</sub> due to the interlevel transitions of the electron in the presence of a donor impurity in its center is calculated. In particular, the dependence of the light absorption coefficient by quantum dots is determined, taking into account their dispersion in size, as the function of the wavelength at electron transitions from volumetric to volumetric state ( $1s \rightarrow 1p$ ) and from volumetric to surface state ( $1s \rightarrow 2p$ ). The maximum values of the absorption coefficient at these transitions are determined. It is established that the absorption associated with the transition from volumetric to volumetric state is much greater than the absorption associated with the transition from volumetric to surface state.

CdS quantum dots in the SiO<sub>2</sub> matrix, which are containing exciton-impurity complexes, are considered:  $D^+ - X$  (positively charged ion of donor impurity  $D^+$  and exciton X);  $A^- - X$  (negatively charged ion of acceptor impurity  $A^-$  and exciton X);  $D^0 - X$  (neutral donor impurity  $D^0$  and exciton X);  $A^0 - X$  (neutral acceptor impurity  $A^0$  and exciton X). The energy of their formation is determined for each of complexes. The results of energy calculations are obtained and comparison has been done with experimental data. The qualitative and quantitative agreements of data is obtained.

The calculation of the linear spectral coefficient of light absorption due to interband transitions of quasiparticles in the CdS/SiO<sub>2</sub> quantum dots in the presence of exciton-impurity complexes ( $D^+ - X$ ,  $A^- - X$ ,  $D^0 - X$ ,  $A^0 - X$ ) is performed. The calculation takes into account the quantum dots dispersion in size. The contribution of each complex in the total absorption coefficient is determined. It is established which complexes were observed experimentally by comparing the calculated absorption curves and experimental photoluminescence curves. Quantitative agreement of the location of the maxima of the calculated absorption and

experimentally determined photoluminescence (taking into account the Stokes shift) was obtained.

The influence of the electron-deformation interaction on the formation of Tamm levels in the InAs quantum dots of the InAs/GaAs heterosystem has been theoretically studied. The dependence of the electronic energy Tamm levels on the quantum dot size is calculated, taking into account the deformation of the heterosystem and without it. To do this, on the one hand, a model of the quantum dot as a semi-finite chain of atoms (Kronig-Penny-Tamm model) is constructed taking into account the change of the lattice constant due to deformation, which in turn depends on the quantum dot size. On the other hand, the quantum dot is modeled by a continuum within the framework of the effective mass theory, the model of the elastic medium and the model of the rectangular potential barrier, which sets the confinement potential for the electron. The models are agreed by equating the energy distances between the first allowed levels in both models.

It is established that due to the electron-deformation interaction, the electron energy of the Tamm surface levels at the hetero boundary of the quantum dot-matrix (InAs / GaAs) increases, while in the volume of the quantum dot the electron energy decreases. The reason for the increase in the energy of the Tamm surface levels at the InAs quantum dot of the InAs/GaAs heterosystem is the decrease the distance between the atoms due to deformation. And the decrease in the electron energy in the volume of a quantum dot is caused by the change the effective depth of potential wells due to the deformation of the quantum dot. It is shown that the energy of the Tamm surface level, taking into account the deformation, increases as the size of the quantum dot decreases. This is consistent with the data of other works, which do not take into account the electron-deformation interaction.

**Key words:** donor and acceptor impurity, quantum dot, interband and interlevel light absorption, surface states, surface polarization trap.

## СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Boichuk V.I. The Effect of Shallow Impurities on the Light Absorption by the Nanocrystals CdS / V. I. Boichuk, R.Ya. Leshko, D.S. Karpyn // UJP. – 2018. – V. 63, No 12. – P. 1088-1094.
2. Boichuk V.I. Analysis of the effect of polarization traps and shallow impurities on the interlevel light absorption of quantum dots / V.I. Boichuk, R.Ya. Leshko, D.S. Karpyn // Condensed Matter Physics. – 2017. – V. 20, № 4. – P. 43704: 1–8.
3. Boichuk V.I. The effect of the neighboring impurity ion on the acceptor interlevel light absorption by CdSe nanocrystal / V. I. Boichuk, R.Ya. Leshko, V. B. Holskyi, D.S. Karpyn // Journal of Physical Studies. – 2016. – V. 20, № 3. – P. 3701(1)-(7).
4. Boichuk V.I. Light absorption of small CdS quantum dots / V.I. Boichuk, R.Ya. Leshko, D.S. Karpyn // Sensor Electronics and Microsystem Technologies. – 2017. – Т. 14. – № 1. – С. 21 – 30.
5. Бойчук В.І. Поверхневі стани у сферичних нанокристалах CdSe, CdTe / В.І. Бойчук, Р.Я. Лешко, Д.С. Карпин. // Sensor Electronics and Microsystem Technologies. – 2018. – Т. 15. – № 1. – С. 5-16.
6. Boichuk V.I. Optical spectra of small CdS nanocrystals / V. I. Boichuk, R.Ya. Leshko, V. B. Holskyi, D.S. Karpyn // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics. – 2016. – V. 6, № 4. – P. 384-390.
7. Peleshchak R.M. Influence of the quantum dot material deformation on Tamm surface levels / R.M. Peleshchak, R.Ya. Leshko, D.S. Karpyn // Sensor electronics and microsystem technologies. – 2020. – Vol 17, № 3. – P. 5-13.
8. Boichuk V. I. Interlevel absorption of electromagnetic waves caused by the polarization traps and shallow impurities / V. I. Boichuk, R.Ya. Leshko, D.S. Karpyn // International conference “Laser technologies. Lasers and their application”, Truskavets, 07.06.17 — 09.06.17. - P. 139-141.



9. Boichuk V.I. Effect of polatization traps, donor and acceptor impurities on the intraband and interband light absorption of quantum dots / V.I. Boichuk, R.Ya. Leshko, D.S. Karpyn, I.I. Ivanchushyn, I.P Toma // Abstract book of the X International conference on topical problems of semiconductor physics (Truskavets, Ukraine, June 26 – 29, 2018). – Truskavets, 2018. – P. 14-16.
10. Бойчук В.І. Вплив мілких домішок на поглинання і люмінесценцію квантових точок CdS / В.І. Бойчук, Р.Я. Лешко, Д.С. Карпин, І.І. Іванчишин, І.П. Тома // Сенсорна електроніка та мікросистемні технології: Тези доповідей 8-ої Міжнародної науково-технічної конференції (Одеса, 28 травня – 1 червня 2018 р.). – Одеса, 2018. – С. 53.

## ЗМІСТ

Вступ .....	12
<b>Розділ 1. Властивості наносистем пов'язані з домішками та гетеромежами.....</b>	<b>18</b>
1.1. Теоретичні моделі наногетеросистеми з домішками.....	18
1.2. Теорія поглинання світла.....	26
1.3. Характеристика гетеромеж .....	34
Висновки до розділу 1 .....	37
<b>Розділ 2. Міжрівневе акцепторне поглинання електромагнітних хвиль квантовими точками <i>CdS</i> з акцепторними домішками .....</b>	<b>38</b>
2.1. Гамільтоніан моделі квантової точки з двома акцепторними домішками. ....	38
2.2. Енергетичний спектр дірки у квантовій точці з двома акцепторними домішками .....	43
2.3. Поглинання електромагнітних хвиль квантовими точками різних розмірів з двома іонами акцепторних домішок.....	45
Висновки до розділу 2 .....	48
<b>Розділ 3. Вплив поверхневої поляризаційної пастки на властивості квантової точки з домішкою .....</b>	<b>49</b>
3.1. Модель квантової точки з домішкою та поверхневої поляризаційної пастки .....	49
3.2. Розрахунок енергетичного спектру електрона у квантовій точці з донорною домішкою .....	54
3.3. Енергетичний спектр електрона у квантовій точці з донорною домішкою та з поляризаційною пасткою на гетеромежі. ....	57

3.4. Коефіцієнт поглинання електромагнітних хвиль квантовою точкою з донорною домішкою і поляризаційною пасткою на гетеромежі квантова точка-матриця .....	59
Висновки до розділу 3 .....	62
<b>Розділ 4. Вплив мілких домішкових станів та екситон-домішкових комплексів на міжзонне поглинання світла системою квантових точок....</b>	<b>63</b>
4.1. Модель квантової точки з мілкою домішкою різної природи.....	63
4.2. Енергія екситона та екситон-домішкових комплексів у квантових точках.....	67
4.3. Поглинання світла екситон-домішковими комплексами .....	69
Висновки до розділу 4 .....	75
<b>Розділ 5. Поверхневі стани квантових точок.....</b>	<b>76</b>
5.1. Модель поверхневих станів у межах поляризаційної пастки.....	76
5.2. Застосування методу стрільби та фазового методу для розрахунку енергетичного спектру.....	79
5.3. Енергія поверхневих станів та розподіл густини ймовірності електрона в околі гетеромежі $CdSe/SiO_2$ та $CdTe/SiO_2$ .....	84
5.4. Таммівські рівні електрона у напруженій квантовій точці .....	91
Висновки до розділу 5 .....	99
<b>Основні результати та висновки .....</b>	<b>100</b>
<b>Список використаних джерел .....</b>	<b>102</b>
<b>Додаток .....</b>	<b>111</b>

## ВСТУП

**Обґрунтування вибору теми дослідження.** Сучасний розвиток нанотехнологій і фізики квантових наносистем ставить питання про вплив якості гетеромеж, розмірів квантових точок (КТ), наявності домішок у них на одночастинкові стани вільних і зв'язаних носіїв заряду [1-3], на електрон-діркові стани та оптичний спектр КТ.

Відомо, що електронні характеристики напівпровідникових приладів вагомо залежать від властивостей меж поділу між різними середовищами в гетероструктурах. У гетероструктурах з КТ, якість та форма гетеромежі (КТ – матриця) визначає транспортні (рухливість, час життя нерівноважних носіїв заряду) характеристики носіїв заряду, оскільки наявність гетеромежі приводить до появи додаткового механізму розсіювання носіїв заряду на нерівностях поверхні [4]. Тому результати теоретичних досліджень впливу якості та геометрії гетеромежі на одночастинкові стани носіїв струму можуть бути використані для розроблення нового класу високошвидкісних оптичних перемикачів, надшвидкодіючих нанотранзисторів, оптично-реєструючих систем запису інформації та приладів високочастотної наноелектроніки. Знаючи закономірності зміни квантових станів електронів внаслідок впливу гетеромежі у наносистемах від їх розмірів, можна прогнозовано керувати параметрами приладів на основі КТ.

Збільшення відношення кількості поверхневих атомів до кількості атомів в об'ємі при зменшенні розмірів КТ супроводжується зростанням ролі поверхневих станів в спектрах поглинання і люмінесценції. Як показують експериментальні роботи з фотолюмінесценції, окрім головних різких піків спостерігається довгохвильовий широкий пік, який пов'язують з домішковими та поверхневими станами. Це стосується гетеросистем  $CdS/SiO_2$ ,  $CdSe/SiO_2$ ,  $CdTe/SiO_2$ ,  $InAs/GaAs$  з КТ ( $CdS$ ,  $CdSe$ ,  $CdTe$ ,  $InAs$ ). Незважаючи на те, що у КТ часто важко встановити природу поверхневих станів, в більшості випадків

червоний спектр випромінювання зумовлений не міжзонними переходами, а електронними переходами з участю поверхневих станів.

Однією з причин виникнення таких станів є наявність поляризаційних зарядів на гетеромежах. Їх величина і потенціальна енергія взаємодії частинки з ними визначаються різницею діелектричних проникностей гетеросистеми та розмірами нанокристалу. Більша різниця діелектричних проникностей та менші розміри КТ посилюють роль поверхневої поляризаційної пастки. Іншою причиною є наявність домішок та деформаційних ефектів у КТ, які можуть кулонівським та електрон-деформаційним полями утримувати заряджену частинку у приповерхневій області.

Тому дослідження впливу домішок, гетеромежі (КТ-матриця) з урахуванням електрон-деформаційної взаємодії на електрон-діркові стани у КТ та оптичний спектр поглинання є **актуальними** з наукової і практичної сторін в плані створення високопродуктивних діодів Шотткі та конструювання джерел випромінювання з високим коефіцієнтом корисної дії.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Дисертаційна робота відповідає основним напрямкам наукової діяльності кафедри фізики Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка. Основні результати отримані в рамках виконання наступних тем:

1. Кафедральна тема “Вирощування та дослідження електричних і оптичних властивостей монокристалів  $A_2B_6$ ,  $A_3B_5$ , керамічних матеріалів та наногетероструктур на їх основі” (2016 – 2020 рр);

2. “Формування надгратки адсорбованих атомів у напівпровідниках із структурою цинкової обманки в електричному та механічному полях” (2019–2021 рр., № ДР: 0119U100667).

Дисертантом проведено теоретичні дослідження електрон-діркових станів та оптичного спектру поглинання КТ з урахуванням впливу домішок та гетеромеж.

## Мета і завдання дослідження

**Метою роботи** є дослідження впливу гетеромежі КТ-матриця та домішок на оптичний спектр поглинання квантових точок.

Для досягнення мети у дисертації розв'язувалися наступні основні завдання:

- дослідження впливу акцепторних домішок на міжрівневе поглинання електромагнітних хвиль;
- розвиток теорії впливу поверхневої поляризаційної пастки та донорної домішки (разом і окремо) на електронні стани та оптичні властивості КТ;
- розрахунок міжзонного поглинання електромагнітних хвиль видимого діапазону для системи КТ з мілкими домішками та екситон-домішковими комплексами;
- дослідження впливу електрон-деформаційної взаємодії на поверхневі стани Тамма квантової точки в наногетеросистемі *InAs/GaAs*.

**Об'єкт дослідження** – сферичні наногетеросистеми з КТ *CdS/SiO<sub>2</sub>*, *CdSe/SiO<sub>2</sub>*, *CdTe/SiO<sub>2</sub>*, *InAs/GaAs*.

**Предмет дослідження** – електронні та діркові стани на поверхні КТ і оптичні спектри поглинання КТ.

## Методи досліджень

Енергетичні спектри електронів та дірок розраховувалися аналітичними і чисельними методами розв'язуванням стаціонарного рівняння Шредінгера в наближенні однозонної та чотиризонної моделі ефективної маси. Розрахунок поверхневих станів у наногетеросистемах виконувався методами Рітца, стрільби, фазовим, методом самоузгодженого електрон-деформаційного потенціалу та поляризаційного потенціалу. Коефіцієнт поглинання

електромагнітних хвиль КТ з домішками і поляризаційною пасткою розраховувався у дипольному наближенні.

### **Наукова новизна одержаних результатів полягає у тому, що вперше:**

- розвинуто метод розрахунку коефіцієнта оптичного поглинання наногетеросистемою  $CdSe/SiO_2$  з КТ з двома акцепторними домішками;
- досліджено роль донорної домішки та поверхневої поляризаційної пастки на гетеромежі КТ-матриця у формуванні поверхневих станів КТ. Встановлено, що донорна домішка та поверхнева поляризаційна пастка індукують виникнення поверхневих станів квантової точки у наногетеросистемі;
- показано, що спектральний коефіцієнт поглинання світла наногетеросистемою  $CdS/SiO_2$  з квантовими точками  $CdS$  розмірами 17 Å та 21,5 Å характеризується двома максимумами, який зумовлений квантовими переходами електрона з утворенням екситон-домішкових комплексів ( $X$ ,  $D^+-X$ ,  $D^0-X$ ,  $A^--X$ ,  $A^0-X$ ). Теоретичне значення спектрального коефіцієнту поглинання добре узгоджується з експериментальними даними;
- встановлено, що енергія поверхневого рівня Тамма у КТ  $InAs$  у наногетеросистемі  $InAs/GaAs$  з урахуванням електрон-деформаційної взаємодії є більшою від відповідної енергії без її врахування. Це зумовлено стиском матеріалу КТ, що приводить до збільшення ступеня перекриття електронних хвильових функцій окремих атомів на поверхні КТ.

### **Практичне значення одержаних результатів**

Результати теоретичних досліджень умов виникнення поверхневих поляризаційних пасток та локальних деформаційних потенціальних ям на межі КТ-матриця можуть бути використані для побудови нових оптичних приладів з розширеним спектральним діапазоном в інфрачервону область, а також для створення ефективних детекторів мікрохвильового випромінювання та для

методу електронної спектроскопії енергетичних рівнів у системах низької розмірності.

### **Особистий внесок здобувача**

Дисертантом обчислено енергетичний спектр акцепторних домішок у сферичній КТ. Досліджено вплив акцепторних домішок на спектри поглинання КТ *CdSe* наногетеросистеми *CdSe/SiO<sub>2</sub>* [1\*-3\*, 8\*-9\*]. Встановлено, що внесок донорної домішки та поверхневої поляризаційної пастки в енергію поверхневих станів [2\*] збільшується при зменшенні розмірів КТ. У роботах [1\*, 10\*] проведено числові розрахунки енергетичного спектру екситон-домішкових комплексів і їх внесок у оптичний спектральний коефіцієнт поглинання. У роботах [4\*-6\*] варіаційним і чисельним методами досліджено умови виникнення поверхневих станів, зумовлених поляризаційною пасткою. Зміну поверхневих станів Тамма у КТ *InAs* наногетеросистеми *InAs/GaAs* під дією електрон-деформаційної взаємодії досліджено у роботі [7\*]. Дисертант брав активну участь у постановці задач, аналізі отриманих результатів і проводив усі обчислення у системах комп'ютерної математики.

**Апробація результатів дисертації.** Матеріали дисертаційної роботи були представлені на міжнародних наукових конференціях “Laser technologies. Lasers and their application” (Truskavets, Ukraine, 07.06.17 — 09.06.17); X International conference on topical problems of semiconductor physics (Truskavets, Ukraine, June 26 – 29, 2018); 8-й Міжнародної науково-технічної конференції (Одеса, 28 травня – 1 червня 2018 р.).

**Публікації.** Результати дисертації опубліковані в 10 роботах, з них: 7 статей (7 з яких видані у фахових фізичних журналах, 4 із них індексуються у



базі Scopus і одна з них – у журналі з Impact Factor) та 3 роботи, що є матеріалами міжнародних конференцій.

**Структура та об'єм дисертації.** Дисертаційна робота складається зі вступу, п'яти розділів, висновків та списку із 81 джерел використаної літератури, одного додатку. Повний обсяг роботи становить 112 сторінок, у тому числі 23 рисунки.

# РОЗДІЛ 1

## ВЛАСТИВОСТІ НАНОСИСТЕМ ПОВ'ЯЗАНІ З ДОМІШКАМИ ТА ГЕТЕРОМЕЖАМИ

### 1.1. Теоретичні моделі наногетеросистеми з домішками

У цьому параграфі зроблено огляд теоретичних робіт, що стосуються дослідженню впливу якості та геометрії гетеромежі, форми та розмірів КТ, наявності мілких домішок донорного та акцепторного типу на одночастинкові стани носіїв струму.

Більшість фізичних властивостей гетеросистем з КТ вагомо залежать від електронної структури КТ. Одночастинкові стани КТ у свою чергу визначається формою, їх розміром, наявністю домішок, якістю гетеромежі, розподілом механічних напружень, які виникають як наслідок неузгодження параметрів ґраток КТ і матриці. Різні значення сталих ґраток і діелектричних проникностей матеріалів КТ та матриці зумовлює утворення дефектів на гетеромежі, які можуть значно змінити властивості квазічастинок у гетеросистемах з КТ, що вплине на роботу різних пристроїв на їхній основі. У роботі [5] визначено вплив дефектних станів гетеромежі на провідність та фотопровідність гетеросистем  $In_xGa_{1-x}As/GaAs$  з КТ  $In_xGa_{1-x}As$  для різного складу  $0 < x < 1$  твердих розчинів. Проведено порівняльний аналіз фотопровідності зразків з різною кількістю концентрації атомів  $In$  у гетероструктурі  $In_xGa_{1-x}As/GaAs$  та визначено латеральний фотострум у гетеросистемах з масивами КТ. Визначено, що при міжзонному збудженні КТ фотонами енергією  $h\nu = 1.2\text{eV}$  існує довготривала динаміка зростання релаксації фотоструму та має місце ефект залишкової провідності.

Для описання пружної деформації твердих тіл, в основному, використовують макроскопічний і мікроскопічний підходи. Перший підхід (наближення суцільного середовища), передбачає усереднення по великій

області, значно більшій від елементарної комірки і полягає у використанні теорії пружності [6]. Ці усереднені величини розглядаються як неперервні функції координат. У мікроскопічних моделях користуються величинами, що стосуються окремих атомів.

Часто для розрахунку розподілу пружних деформацій у КТ застосовуються різні чисельні методи, які перетворюють систему диференціальних рівнянь у систему лінійних рівнянь. Для чисельного розв'язання такої системи рівнянь, як правило, використовується алгоритм спряженого градієнта. Крім чисельних методів відомі й аналітичні методи знаходження розподілу пружних деформації, зокрема метод функцій Гріна [7–11]. У роботах [10, 11] автори застосували зазначений метод до КТ для випадку анізотропних середовищ.

Різні форми КТ і перерозподіл пружних деформацій на гетеромежі КТ-матриця проаналізовано в роботі [11]. Також встановлено межі застосування ізотропного наближення для наноструктур.

Окрім пружних деформацій, вагомий вплив на властивості одночастинкових станів у КТ мають діелектричні властивості матриці. Наближення діелектричного континууму є правильним, якщо розміри наносистеми є більші від сталої ґратки. Ця умова ще і є умовою придатності методу ефективної маси та теорії пружності.

Загалом діелектрична проникність у наногетероструктурах є функцією координат, яка враховується при розв'язанні рівняння Пуассона. У роботах [12–13] 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 квазічастинок, 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 діелектричної проникності матриці, то глибина ефективних потенціальних ям зменшується, тому енергія квазічастинок збільшується. Саме різні значення діелектричної проникності КТ і матриці зумовлюють появу поляризаційних зарядів на гетеромежах[12-15]. У цих роботах також визначено потенціальну енергію взаємодії електрона з поляризаційними зарядами, які цей електрон сам створив (потенціал самодії). Показано, що для великих розмірів КТ поляризаційний потенціал самодії збільшує енергію частинки у КТ за умови, що діелектрична проникність КТ більша від діелектричної проникності матриці. Однак у цих роботах не проаналізовано залежність для малих розмірів КТ, коли квазічастинка виштовхується з КТ. У таких випадках можливе попадання частинки у приповерхневу поляризаційну пастку, яка зумовлена потенціалом самодії. Це все може зумовити виникнення поверхневих поляризаційних станів у КТ.

Відмінність між діелектричними проникностями КТ і матриці за наявності водневоподібної домішки враховано у роботі [15]. Отримано енергетичний спектр і хвильові функції домішкового електрона у сферичних квантових точках у середовищах з різною ефективною масою та величинами діелектричної проникності. Знайдені розв'язки виражено за допомогою регулярної функції Кулона та функції Віттекера, коли домішка розташована у центрі КТ. Для нецентрального положення донорної домішки рівняння Шредінгера розв'язано варіаційним методом Рітца.

Шляхом врахування поляризації визначено енергетичні рівні електрона з донорною домішкою у сферичній КТ [16-17]. Одержані результати показали якісну та кількісну відмінність від відповідних результатів без врахування поляризаційних зарядів. Встановлено, що для наногетеросистем з квантовими точками, в яких діелектричні проникності КТ і матриці значно відрізняються, енергії квантових рівнів електронів і дірок при великих розмірах КТ відрізнятимуться від відповідних енергій з використанням середнього значення

діелектричної проникності  $\varepsilon_c$  на величину  $13.6 m_1^* (1/\varepsilon_c^2 - 1/\varepsilon_1^2) / (n+l)^2$  еВ, де  $\varepsilon_1$  – діелектрична проникність КТ,  $m_1^*$  – ефективна маса електрона (дірки),  $n$ ,  $l$  – квантові числа. А для малих радіусів КТ, де вже важливу роль відіграє поверхня гетеромежі, одержано немонотонну зміну енергії домішкового електрона у КТ.

Використовуючи варіаційний метод Рітца та метод розкладу за повною системою функцій, визначено енергію одної та двох донорних домішок, що розташовані не в центрі КТ [15, 18] на відстані  $D$  від її центру. Показано, що внаслідок порушення симетрії енергетичні рівні розщеплюються, причому кількість розщеплених гілок відповідає тій кількості значень, що може приймати модуль магнітного квантового числа для заданого стану. Проведене обчислення лінійним варіаційним методом дало можливість визначити межі адекватного застосування запропонованого методу і теорії збурень, коли домішка не значно віддалена від центру  $D \in (0, 0.15a)$  ( $a$  – радіус КТ), поки похибка теорії збурень відносно варіаційного методу не перевищує 15%.

На основі точного розв'язку рівняння Пуассона для двошарової сферичної КТ одержано загальну формулу для повної потенціальної енергії електрона [19], введено ефективні потенціальні ями для електрона у гетероструктурі. З отриманою потенціальною енергією розв'язано рівняння Шредінгера для дискретного спектра водневоподібної домішки. Також досліджено залежність квазістаціонарних енергетичних рівнів і визначено середню тривалість життя частинки у цих станах. Обчислення показали, що врахування різних значень діелектричних проникностей гетеросистеми значно змінює дискретний енергетичний спектр водневоподібної домішки у тришаровій сферичній наногетероструктурі порівняно з випадком використання середнього значення діелектричної проникності. Визначено квазістаціонарні енергетичні стани домішки, які за характером залежності якісно схожі до відповідних станів у відкритій двошаровій КТ без домішки [20-22].

Використовуючи розв'язок рівняння Пуассона, одержано загальну формулу для повної потенціальної енергії електрона у сферичній квантовій антиточці (КАТ) [23], введено ефективний потенціальний бар'єр для електрона у гетероструктурі. З отриманою потенціальною енергією розв'язано рівняння Шредингера для стаціонарних станів водневоподібної домішки. Встановлено, що для високих і малих потенціальних бар'єрів зміна енергії, як функції радіуса КАТ, має різний характер. Це зумовлено можливістю тунелювання електрона з матриці у внутрішню частину КАТ. Для малих бар'єрів цей процес є більш ймовірним, ніж для великих. Показано, що для КАТ гетероструктури  $CdS/\beta\text{-HgS}$  з домішкою електрон з великою ймовірністю знаходиться зовні КАТ. Обчислені енергії квазістаціонарних рівнів виявили монотонну залежність від розмірів КАТ, які зменшуються при зростанні радіуса, а середній час життя електрона у відповідних станах експоненційно зростає.

Описані задачі у роботах [11-23] розв'язані з використанням методу ефективної маси, яку введено на основі припущення, що зона провідності та валентна зона є не виродженими у центрі зони Бріллюена і мають параболічний закон дисперсії. Для більшості кристалів це має місце, коли мова йде про зону провідності. Для валентної зони слід враховувати, те, що вона є виродженою у центрі зони Бріллюена (зона важких і легких дірок), а також можливу взаємодію з спин-відщепленою зоною. Саме такі наближення враховано у роботах [24-27].

Застосовуючи теорію Латтінджера-Кона до кристалів з кубічною симетрією, одержано [28-29] гамільтоніан у випадку вироджених зон. Для кристалів з сильною спин-орбітальною взаємодією, нехтуючи гофрованістю ізоенергетичних поверхонь [30-31], записано сферичний гамільтоніан, проведено розділення всіх станів на три типи. Переходячи до спірного зображення гамільтоніана, одержано радіальні рівняння для різних типів станів. Враховуючи неперервність хвильової функції та швидкості потоку густини ймовірності, послідовно визначено граничні умови [32-34]. Нехтуючи

недіагональними членами радіального гамільтоніана, виведено і наближені граничні умови [35]. Одержані рівняння застосовано для визначення діркових та акцепторних станів у КТ сферичної форми.

Для сферичної КТ на основі чотиризонної моделі розв'язано систему зв'язаних диференціальних рівнянь другого порядку, з яких визначено енергію дірки [25, 27]. Базуючись на точних розв'язках дірки у сферичній КТ, побудовано наближену хвильову функцію акцептора для I та II типу станів. Для III типу станів знайдено точні розв'язки. Проведено порівняння одержаних результатів з результатами однозонної моделі. Встановлено, що з врахуванням складного спектра валентної зони отримуємо менші значення енергії дірки, ніж при врахуванні лише зони легких дірок. Однак ці енергії є більшими, ніж коли враховувати лише зони важких дірок.

На основі чотиризонного гамільтоніана знайдено точні розв'язки відповідних радіальних рівнянь без домішки у двошаровій КТ [36]. За наявності акцепторної домішки у цій же структурі знайдено точні розв'язки рівняння для III типу станів, що описується одним диференціальним рівнянням. Матричне радіальне диференціальне рівняння для акцепторної домішки розв'язано наближено з використанням точних розв'язків задачі без домішки. Отримано залежності енергії акцепторної домішки від ширини приповерхневого шару КТ. Одержані аналітичні розв'язки можна використати також для визначення спектра  $n$ -шарових сферично-симетричних закритих КТ. Показано, що енергетичні спектри дірки та акцептора сильно залежать від геометричних розмірів першої гетеромежі. Друга гетеромежа чинить менший вплив на енергію. Однак, якщо розмір першого приповерхневого шару КТ досить малий, то вплив другої гетеромежі може посилюватися. Визначено, що акцепторна домішка є причиною зменшення енергії дірки гетеросистеми як для малих, так і для великих радіусів.

Аналогічно, використовуючи теорію Латтінджера для кристалів з кубічною симетрією одержано гамільтоніан розмірністю  $3 \times 3$ , в якому

знехтувано спін-орбітальною взаємодією, внаслідок її малості. З цим гамільтоніаном у сферичному наближенні для ізоенергетичних поверхонь одержано радіальні рівняння для трьох типів станів. На основі умов неперервності хвильової функції та потоку густини ймовірності записано граничні умови. Визначено також і наближену граничну умову, яка одержана шляхом нехтування недиагональних елементів у матричному радіальному рівнянні для I типу станів.

У роботі [27] застосовано тризонну модель (слабка спін-орбітальна взаємодія) при обчисленні діркових та акцепторних станів у сферичній КТ  $Si/SiO_2$ , обґрунтовано адекватність використання тризонної моделі. Для діркових станів знайдено точні розв'язки всіх радіальних рівнянь. Показано, що використання тризонної моделі дає кількісно відмінні результати порівняно з однозонними моделями (важких чи легких дірок). Радіальні рівняння для II та III типу станів акцепторної домішки розв'язано точно, а для I типу розв'язки знайдено, розклавши хвильову функцію домішки по функціях задачі без домішки. На основі тризонного гамільтоніана для дірки у сферичній двошаровій закритій КТ знайдено точні розв'язки відповідних радіальних рівнянь, досліджено вплив поляризаційних зарядів двох гетеромереж на енергетичні спектри дірки. Знайдено точні розв'язки рівнянь для двох типів станів акцепторної домішки. Матричне радіальне диференціальне рівняння для акцепторної домішки розв'язано наближено з використанням точних розв'язків задачі без домішки. Одержано залежності енергії акцепторної домішки від ширини приповерхневого шару КТ. Показано, що зміна розміру поверхневої оболонки КТ сильніше впливає на енергетичний спектр акцепторної домішки, ніж на діркові спектри. Встановлено, що має місце сильніша залежність ефективних потенціальних ям для дірки акцепторної домішки від зовнішнього розміру поверхневої оболонки, ніж у випадку без домішки.

Ґрунтуючись на тризонній моделі для діркових та параболічній однозонній моделі для електронних станів, побудовано хвильову функцію



екситона у вигляді добутку електронної та діркової функцій основного стану, що справедлива для малих радіусів квантової точки. Проведені дослідження енергії основного стану екситона показали, що його енергія залежить від розмірного квантування енергії електрона і дірки у КТ та діелектричних властивостей як КТ, так і матриці. Крім того, обчислення дали можливість з'ясувати, що врахування складної зонної структури кількісно змінює результати обчислень порівняно з простою моделлю валентної зони. Проведено порівняння результатів обчислень з експериментальними даними [37-41], що показало як якісну, так і добру кількісну збіжність одержаних результатів.

Як впливає з приведенного огляду літератури у цьому параграфі у вище згаданих роботах при розрахунках електронних і діркових станів у наногетеросистемах з КТ, що містять домішки, не враховано існування поверхневих станів і їх залежність від геометричного положення домішок та гетеромержі КТ-матриця.

Однак саме поверхневі стани часто є причиною появи довгохвильових піків у спектрах люмінесценції і поглинання. Саме тому у дисертаційній роботі буде розглянуто поверхневі та об'ємні стани, які зумовлені домішками різних типів, поляризаційними зарядами і електрон-деформаційною взаємодією між КТ і матрицею.

## 1.2. Теорія поглинання світла

Ще з 90 років минулого століття напівпровідникові КТ почали застосовувати в оптоелектроніці. Зокрема, завдяки вузькому спектру випромінювання монодисперсних КТ появилася можливість використання КТ у світловипромінюючих діодах. Саме світлодіоди на основі КТ мають кращі спектральні характеристики порівняно з рідкими кристалами чи світлодіодами на основі органічних матеріалів. Ще однією причиною використання КТ у електроніці є їх мала енергоємність та високий коефіцієнт корисної дії.

Як відомо, електронними та оптичними властивостями КТ можна керувати шляхом зміни їхніх розмірів, форми, введенням домішок, накладанням зовнішніх електричних і магнітних полів. Також вагомий вплив на характеристики КТ здійснює середовище, у якому КТ знаходяться (матриця). Півширина енергетичних рівнів КТ також залежить і від температури. У цьому плані важливим є створення високопродуктивних наноструктур зі стабільними параметрами при кімнатних температурах. Це спонукає проведення експериментальних та теоретичних досліджень з метою вивчення зазначених впливів.

Проведені експериментальні дослідження та їх аналіз показав [42], що використовуючи нанокристали телуриду, селеніду та сульфїду кадмію, можна отримати випромінювання видимого оптичного діапазону. Причому діапазон зміни радіусів нанокристалів становив від 10 Å до 40 Å. Для зазначених розмірів КТ проведено дослідження спектрів поглинання, люмінесценції, проаналізовано зміну величини забороненої зони. Відповідний аналіз експериментальних робіт приведено в оглядовій статті [43]. Там також подано порівняння експериментальних даних з теорією. Показано, що застосування методу ефективної маси чи *kp*-теорії дає добрі результати, коли діаметри КТ не менші 4 нм. Для КТ менших розмірів для адекватного описання використовують метод сильного зв'язку, що досить добре узгоджується з

експериментом, зокрема при встановленні величини зміни забороненої зони внаслідок квантоворозмірного ефекту. Тут же і висловлено припущення, що причиною існування довгохвильових піків є домішки різної природи і поверхня нанокристалів.

У роботі [43] також проаналізовано технології синтезу КТ та їх впровадження у полімерну матрицю. Зокрема, колоїдна технологія дає змогу отримати КТ, форма яких близька до сферичної.

Теорія міжзонного поглинання світла ґрунтується на електрон-фотонній взаємодії. Гамільтоніан, що описує взаємодію електрона з електромагнітним полем кристала, можна записати у вигляді:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_0} \left( \vec{\hat{p}} - \frac{e}{c} \vec{\hat{A}} \right)^2 + V(\vec{r}). \quad (1.1)$$

Розкриваючи дужки, та використовуючи перестановочне співвідношення для оператора імпульсу та вектора-потенціалу, (1.1) можна записати у формі:

$$\hat{H} = \left( \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right) - \frac{e}{m_0 c} \vec{\hat{p}} \vec{\hat{A}} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}. \quad (1.2)$$

Доданком пропорційним квадрату вектора потенціалу знехтувано, внаслідок його малості. Наприклад, для світлового потоку, що у десять раз перевищує потік сонячного випромінювання на межі атмосфери, частоти  $10^{14}$  Гц, температурі 300 К зазначений доданок є порядку  $10^{-8}$  порівняно з  $\hat{H}_{\text{int}}$ . Нехай векторний потенціал має вигляд плоскої монохроматичної хвилі частоти  $\omega_0$  з хвильовим вектором  $\vec{k}$  і поляризацією  $\vec{e}_p$ :

$$\vec{\hat{A}} = A_0 \vec{e}_p \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega_0 t). \quad (1.3)$$

Відповідно напруженість електричного поля електромагнітної хвилі визначається за формулою:

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\hat{A}}}{\partial t} = A_0 \vec{e}_p \frac{\omega_0}{c} \sin(\vec{k}\vec{r} - \omega_0 t). \quad (1.4)$$

Середня за часом густина енергії електромагнітного поля дорівнює числу фотонів в одиниці об'єму:

$$\frac{1}{V} N \hbar \omega_0 = \frac{\overline{E^2}}{4\pi} = \frac{A_0^2 \omega_0^2}{8c^2 \pi}. \quad (1.5)$$

Тут використано, що середня електрична енергія дорівнює середній магнітній енергії у електромагнітному полі, а також, що середнє значення синуса у квадраті дорівнює 1/2. З останнього виразу можна знайти  $A_0$ , підставити його значення у (1.4). Після перетворень гамільтоніан електрон-фотонної взаємодії має вигляд:

$$\hat{H}_{\text{int}} = -\frac{e}{m_0} \sqrt{\frac{2N\hbar\pi}{\omega_0 V}} \exp(-i\vec{k}\vec{r}) (\vec{\epsilon}_p \cdot \vec{\hat{p}}). \quad (1.6)$$

Експоненту можна розкласти у ряд, зберігши перший член розкладу, бо довжина електромагнітної хвилі у більшості експериментальних умовах є більшою за характерні електронні відстані системи. Тому згідно з цією умовою, а також вважаючи  $N=1$  (одnofотонне наближення), гамільтоніан електрон-фотонної взаємодії запишеться у вигляді:

$$\hat{H}_{\text{int}} = -\frac{e}{m_0} \sqrt{\frac{2\hbar\pi}{\omega_0 V}} (\vec{\epsilon}_p \cdot \vec{\hat{p}}). \quad (1.7)$$

Оператор взаємодії не враховує внески спіно-орбітальної взаємодії та ефекти, що пов'язані зі зміною магнітного поля при цьому.

Згідно з «золотим правилом» Фермі, ймовірність квантового переходу за одиницю часу між станами  $|i\rangle, |f\rangle$ , що є власними векторами  $\hat{H}_0$  з (1.2) запишеться у вигляді:

$$\tilde{W}_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \hat{H}_{\text{int}} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega_0). \quad (1.8)$$

Якщо врахувати, що заселеність рівнів визначається розподілом Фермі-Дірака  $f(E)$ , то ймовірність переходу  $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$  за одиницю часу

$$W_{if} = \tilde{W}_{if} f(E_i) [1 - f(E_f)]. \quad (1.9)$$

Отже, результатом переходів  $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$  за одиницю часу є втрата електромагнітною хвилею енергії  $\hbar\omega_0 W_{if}$ . Зворотні переходи  $|f\rangle \rightarrow |i\rangle$  ведуть до величини:

$$W_{fi} = \tilde{W}_{fi} f(E_f) [1 - f(E_i)]. \quad (1.10)$$

Отже, загальна втрата енергії електромагнітної хвилі за одиницю часу, що пов'язана з переходами  $|i\rangle \leftrightarrow |f\rangle$  визначається  $\hbar\omega_0(W_{if} - W_{fi})$ . Просумувавши по всіх станах, отримано загальне зменшення енергії електромагнітного поля за одиницю часу:

$$W(\omega_0) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{2\hbar\pi e^2}{m_0^2 \omega_0 V} \sum_{i,f} |\langle f | \tilde{\mathbf{e}}_p \cdot \tilde{\mathbf{p}} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega_0) [f(E_i) - f(E_f)]. \quad (1.11)$$

Відповідно до цього спектральний коефіцієнт поглинання визначатиметься за формулою:

$$\alpha(\omega_0) = \frac{W(\omega_0)}{nc} = \gamma \sum_{i,f} \frac{1}{m_0} |\langle f | \tilde{\mathbf{e}}_p \cdot \tilde{\mathbf{p}} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega_0) [f(E_i) - f(E_f)], \quad (1.12)$$

де  $n$  – показник заломлення,  $\gamma = \frac{4\pi^2 e^2}{ncm_0 \omega_0 V}$  має розмірність оберненої довжини, а

вираз під знаком суми – безрозмірний. Зазначений коефіцієнт поглинання не враховує спонтанне випромінювання внаслідок класичного описання електромагнітного поля. Однак це практично не впливає на визначення спектрального коефіцієнта поглинання (1.12). Міжзонне поглинання світла завжди веде до утворення взаємодіючих електрон-діркових пар – екситонів, та екситон-домішкових комплексів.

Описане вище явище поглинання світла стосується високоенергетичних переходів між зонами. Як показують експериментальні дослідження, важливими є також міжрівневі внутрізонні переходи у КТ. Оскільки енергії таких переходів лежать у терагерцовому діапазоні, то КТ можна використовувати для побудови джерел і детекторів терагерцового випромінювання [15, 18]. Відповідно до цього появились теоретичні роботи, де досліджено міжрівневі переходи у КТ, обчислено коефіцієнти поглинання та показники заломлення світла [47]. Визначено вплив домішок на зазначені величини у сферичних КТ. У цих роботах коефіцієнти поглинання світла

отримані з використанням підходу матриці густини [48]. У цьому підході розв'язується феноменологічне рівняння руху для матриці густини:

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_{mn} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H} + V, \hat{\rho}]_{mn} - \hat{\Gamma}_{mn} (\hat{\rho}_{mn} - \hat{\rho}_{mn}^{(th)}), \quad (1.13)$$

де  $\hat{H}$  – гамільтоніан системи, що задовольняє стаціонарне рівняння Шредінгера  $\hat{H}|m\rangle = E_m|m\rangle$ ,  $V$  – зовнішнє збурення, яке вважається малим,  $\hat{\rho}$  – матриця густини,  $\hat{\rho}^{(th)}$  – рівноважна матриця густини, що описується розподілом Больцмана:

$$\rho_{mn}^{(th)} = \delta_{mn} \frac{\exp\left(-\frac{E_m}{kT}\right)}{\sum_m \exp\left(-\frac{E_m}{kT}\right)}, \quad (1.14)$$

$\Gamma_{m,n} = T_{m,n}^{-1}$  – матричний елемент феноменологічної сталої релаксації на базисі, при якому гамільтоніан є діагональним. Загальний розв'язок рівняння (1.13) в інтегральній формі має вигляд:

$$\rho_{mn}(t) = \int_{-\infty}^t \left\{ \Gamma_{mn} \rho_{mn}^{(th)} + \frac{i}{\hbar} \sum_{m'} [\rho_{mm'}(t') V(t')_{m'n} - V(t')_{mm'} \rho_{m'n}(t')] \right\} e^{(i\omega_{mn} + \Gamma_{mn})(t'-t)} dt', \quad (1.15)$$

де  $\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar$ . Така форма рівняння є більш придатною для використання методики теорії збурень, що залежить від часу, до рівняння матриці густини.

За наявності зовнішнього поля, яке можна розглядати, як збурення першого порядку малості, матричні елементи матриці густини можна подати у вигляді:

$$\rho_{mn}(t) = \rho_{mn}^{(0)}(t) + \rho_{mn}^{(1)}(t) + \rho_{mn}^{(2)}(t) + \dots + \rho_{mn}^{(k)}(t) + \dots \quad (1.16)$$

Підстановка (1.16) у (1.15) дає змогу отримати:

$$\rho_{mn}^{(k)}(t) = \int_{-\infty}^t \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{m'} [\rho_{mm'}^{(k-1)}(t') V(t')_{m'n} - V(t')_{mm'} \rho_{m'n}^{(k-1)}(t')] \right\} e^{(i\omega_{mn} + \Gamma_{mn})(t'-t)} dt', \quad (1.17)$$

де  $k = 1, 2, \dots$ . Отже, знаючи наближення нульового порядку, можна визначити довільне число доданків (1.16), а значить записати  $\rho_{mn}(t)$  з довільною точністю.

Для монохроматичної хвилі, що поляризована вздовж осі  $z$ , вектор напруженості поля можна записати у формі:

$$\vec{E}(t) = [\tilde{E}_z e^{-i\omega_0 t} + \tilde{E}_z^* e^{i\omega_0 t}] \vec{e}_z. \quad (1.18)$$

Якщо довжина хвилі світла набагато більша від довжини зразка (а це справедливо для нанокристалів), на який вона падає, то у його межах фаза хвилі  $2\pi z / \lambda_0$  практично не змінюється. Тому  $2\pi z / \lambda_0 \rightarrow 0$  та  $\tilde{E}_z$  і  $\tilde{E}_z^*$  не змінюються у межах розглядуваної системи. Зі зробленими припущеннями формула для визначення взаємодії заряду з електромагнітним полем падаючої хвилі має вигляд:

$$\hat{V}(\vec{r}, t) = -\vec{d} \cdot \vec{E}(t) = q\vec{r} \cdot \vec{E}(t). \quad (1.19)$$

Після підстановки (1.19) у (1.18), отримано:

$$\hat{V}(\vec{r}, t) = q\vec{r} \cdot [\tilde{E}_z e^{-i\omega_0 t} + \tilde{E}_z^* e^{i\omega_0 t}] \vec{e}_z = qz [\tilde{E}_z e^{-i\omega_0 t} + \tilde{E}_z^* e^{i\omega_0 t}]. \quad (1.20)$$

Відповідно матричний елемент оператора збурення у представленні, в якому  $\hat{H}$  є діагональним, має вигляд:

$$V_{mn} = qz_{nm} [\tilde{E}_z e^{-i\omega_0 t} + \tilde{E}_z^* e^{i\omega_0 t}]. \quad (1.21)$$

Розглянемо дворівневу систему. Тоді  $n, m = 1, 2$ . Для дворівневої системи матриця дипольного моменту має вигляд:

$$qz = \begin{pmatrix} 0 & qz_{12} \\ qz_{21} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & qz_{12} \\ qz_{12} & 0 \end{pmatrix} \quad (1.22)$$

при умові, що дипольні переходи між станами 1-2 дозволені. Відповідно до цього матриця густини буде також розмірністю  $2 \times 2$ .

Вираз (1.21) підставляється у (1.17). Це дає змогу знайти лінійний та нелінійні доданки матриці густини (1.16). Надалі розглядається лінійне наближення. Тоді  $\rho_{mn}(t) = \rho_{mn}^{(0)}(t) + \rho_{mn}^{(1)}(t)$ . У цьому наближенні

$$\rho_{mn} = \rho_{mn}^{(0)} + \rho_{mn}^{(1)} = \delta_{mn} \frac{\exp\left(-\frac{E_m}{kT}\right)}{\sum_m \exp\left(-\frac{E_m}{kT}\right)} - \frac{(\rho_{nn}^{(0)} - \rho_{mm}^{(0)})}{\hbar} \left( \frac{qz_{mn} \tilde{E}_z e^{-i\omega_0 t}}{(\omega_{mn} - \omega_0) - i\Gamma_{mn}} + \frac{qz_{mn} \tilde{E}_z^* e^{i\omega_0 t}}{(\omega_{mn} + \omega_0) - i\Gamma_{mn}} \right). \quad (1.23)$$

Під дією електромагнітної хвилі середовище поляризується. Розглядається ізотропне середовище. Середнє значення  $z$  проекції вектора поляризації пов'язане із середнім значенням дипольного моменту одиниці об'єму:

$$P_z(t) = \frac{1}{V} \text{Sp}(qz\rho) \quad (1.24)$$

З урахуванням (1.22) отримаємо

$$qz\rho = \begin{pmatrix} 0 & qz_{12} \\ qz_{21} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} qz_{12}\rho_{21} & qz_{12}\rho_{22} \\ qz_{21}\rho_{11} & qz_{21}\rho_{12} \end{pmatrix}.$$

Тоді згідно з (1.24),  $z$ -проекція вектора поляризації запишеться у формі

$$P_z(t) = \frac{1}{V} \text{Sp}(qz\rho) = \frac{1}{V} (qz_{12}\rho_{21} + qz_{21}\rho_{12}) = \frac{q}{V} (z_{12}\rho_{21} + z_{21}\rho_{12}). \quad (1.25)$$

Враховуючи (1.23), середнє значення проекції вектора поляризації буде визначатися за формулою:

$$P_z(t) = \frac{|qz_{21}|^2}{V} \left( \tilde{E}_z e^{-i\omega_0 t} \left[ -\frac{(\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)})}{(E_{21} - \hbar\omega_0) - i\hbar\Gamma_{21}} - \frac{(\rho_{22}^{(0)} - \rho_{11}^{(0)})}{(E_{12} - \hbar\omega_0) - i\hbar\Gamma_{12}} \right] + \tilde{E}_z^* e^{i\omega_0 t} \left[ -\frac{(\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)})}{(E_{21} + \hbar\omega_0) - i\hbar\Gamma_{21}} - \frac{(\rho_{22}^{(0)} - \rho_{11}^{(0)})}{(E_{12} + \hbar\omega_0) - i\hbar\Gamma_{12}} \right] \right), \quad (1.26)$$

де  $E_{mn} = \hbar\omega_{mn}$ . З виразу (1.26) видно, що електрична сприйнятливість у системі СІ має вигляд:

$$\chi = \frac{1}{\varepsilon_0} \left( \frac{(\rho_{22}^{(0)} - \rho_{11}^{(0)})\sigma |qz_{21}|^2}{(E_{21} - \hbar\omega_0) - i\hbar\Gamma_{21}} + \frac{(\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)})\sigma |qz_{21}|^2}{(-E_{21} - \hbar\omega_0) - i\hbar\Gamma_{12}} \right), \quad (1.27)$$

де  $\sigma = 1/V$ ,  $\varepsilon_0$  – електрична стала.

На практиці часто розглядають частоти падаючих хвиль, що близькі до відповідних резонансних енергій. Тому другий доданок у (1.27) є малий і ним можна знехтувати. Розглядаються низькі температури  $T \rightarrow 0$ . При умові  $E_2 > E_1$ , знаходячи границю, маємо:

$$\chi\varepsilon_0 = \frac{\sigma |qz_{21}|^2}{(E_{21} - \hbar\omega_0) - i\hbar\Gamma_{21}}. \quad (1.28)$$



Уявна частина від цієї величини дає коефіцієнт міжрівневого поглинання лінійно поляризованого світла для дворівневої системи:

$$\alpha(\omega_0) = \text{Im}(\chi\mathcal{E}_0) = \frac{\sigma \hbar \Gamma_{21} |qz_{21}|^2}{(E_{21} - \hbar\omega_0)^2 - (\hbar\Gamma_{21})^2}. \quad (1.29)$$

Отриману формулу було застосовано у ряді робіт, зокрема у [15, 18, 49-50], для обчислення коефіцієнта поглинання, що зумовлений міжрівневими переходами.

Якщо продовжити ітераційну процедуру, то можна отримати нелінійні коефіцієнти поглинання. Зокрема у [50] показано, що для кристалів кубічної симетрії нелінійний другого порядку коефіцієнт поглинання дорівнює нулю. Також дорівнює нулю нелінійний коефіцієнт поглинання другого порядку для ізотропних сферично-симетричних систем, які опромінюють лінійно поляризованим світлом. Однак для будь-яких кристалів нелінійний коефіцієнт поглинання третього порядку не дорівнює нулю. Відповідно до цього проведено обчислення також нелінійних оптичних властивостей КТ з домішками і без них.

Як показує огляд робіт з теорії поглинання світла, відсутні роботи про міжрівневе поглинання світла, що зумовлене переходами за участю поверхневих станів різної природи (поверхнева поляризаційна пастка і поверхневі деформаційні стани). Зазначені питання визначають місце цієї дисертаційної роботи з поміж інших робіт та формують її актуальність.

### 1.3. Характеристика гетеромереж

На сьогодні напівпровідникові КТ можуть бути створені, використовуючи значну кількість різних нанотехнологій, що різняться собою середовищем, у якому КТ вирощуються, різноманітними умовами росту, діапазоном розмірів та дисперсією за розмірами, а також і за формою. Відповідно до технологій отримання, КТ можуть вирощуватися у різних видах неорганічного скла, кристалах, рідких розчинах та полімерах, а також на кристалічній поверхні.

Загалом усі методи отримання наносистем можна розділити на дві групи: фізичні та хімічні. До першої групи методів відносять конденсацію при низьких температурах, молекулярно-променеву епітаксію, іонну імплантацію, газофазове компанування, методи лазерного випаровування, контрольовану кристалізацію, диспергування та подрібнення. До хімічних способів відносять методи хімічної конденсації парів, отримання гель-золь шляхом рідкофазного відновлення, радіоліз, матричний синтез. На практиці можливе і поєднання зазначених методів.

Одними з перших квазінульвимірних (0D) нанооб'єктів стали КТ, що вирощені на основі з'єднань типу  $A^m B^n$  у склоподібній матриці. Мікрокристали практично сферичної форми утворюються у результаті кристалізації відповідних компонентів, введених у силікатне скло, при його охолодженні і перекристалізації в процесі подальшої термообробки. Звісно при такому підході неможливо було створити сферичні КТ однакового радіусу. Тому спостерігалось неоднорідне розширення спектральних ліній оптичного поглинання, відбивання чи люмінесценції. Якщо ж вдається спостерігати спектр люмінесценції дуже вузької ділянки (при можливості одинарної КТ), то неоднорідне розширення смуг люмінесценції змінюється вузькими лініями, що характерні для атомної спектроскопії.

На початку 21 століття був розроблений метод створення  $0D$  наноструктур – синтез нанокристалів з колоїдних систем з використанням поверхнево активних речовин [51-54]. Отримані КТ при цьому характеризуються малою дисперсією за розмірами  $<5\%$ . Оскільки кристаліти в процесі росту знаходяться у рідкому стані, то внаслідок поверхневого натягу отримують форму, що близька до сферичної або еліпсоїдальна.

Про сферичну форму  $CdSe$  КТ свідчать зображення отримані просвічуючим електронним мікроскопом. Відповідні КТ були отримані з використанням так званого золь-гелевого методу вирощування [54]. Цим же методом отримано квантові стержні короткої довжини, які можна вважати КТ циліндричної форми.

Більше практичне значення мають КТ, що вирощені у напівпровідниковій матриці. Для цього використовують методи самоорганізації кристалів у процесі епітаксійного росту [55-56]. Ці процеси ґрунтуються на властивостях субмоношарових покриттів гетероструктур з невеликою, але постійною різницею сталих ґратки, що приводить до виникнення напруженого стану; і на різних швидкостях латерального і вертикального росту, а також на властивостях косих зрізів поверхні зростання. Утворені в результаті КТ уже не мають форму кулі, але, як правило, кристалізуються у вигляді простих геометричних фігур. Наприклад, КТ формуються у вигляді чотиригранної піраміди у випадку вирощування нанокристалів  $InAs$  в матриці  $GaAs$ . Існують також експериментальні роботи, в яких стверджується, що КТ вирощені зазначеним методом можуть мати форму зрізаної піраміди кубів чи лінз [57-59]. Слід зазначити, що КТ вирощені цим методом можуть мати також форму близьку до еліпсоїда. Однак при теоретичному аналізі у нульовому наближенні за основу вибирають сферу. Тоді не сферичність враховують як поправки.

Таким чином огляд експериментальних робіт показав, що на сьогодні можливо отримати КТ різноманітних форм та розмірів. Однак варто відзначити, що у зв'язку з дискретною атомною структурою кристалів, не існує абсолютно

гладких поверхонь КТ, тому ідеальних геометрично правильних КТ з рівною гетеромежею не існує. Реальні КТ з високою долею ймовірності можна відносити до тієї чи іншої геометричної форми. У зв'язку з цим при дослідженні оптичних властивостей можуть проявлятися ефекти, що пов'язані з варіацією поверхні масиву квантових точок, які поміщені у матрицю. Останнє зумовлює виникнення поверхневих станів. Саме це спонукає до послідовного теоретичного вивчення КТ з ідеальною геометричною гетеромежею, зокрема сферичною, на формування поверхневих станів і оптичні властивості КТ. Саме ці питання будуть розв'язані у дисертаційній роботі.

## Висновки до розділу 1

1. Проведено літературний огляд опису електронних і діркових станів у наногтеросистемах з квантовими точками, що містять донорні або акцепторні домішки залежно від їхнього геометричного положення.
2. Проаналізовано експериментальні роботи з поглинання і люмінесценції, які пов'язані з поверхневими та домішковими станами у квантових точках. Зазначено, що поверхневі стани є причиною появи довгохвильових піків у спектрах люмінесценції і поглинання.
3. Розглянуто теорію поглинання світла у квантових точках у лінійному наближенні. Приведено аналіз застосування теорії поглинання до квантових точок, в якому показано, що відсутні роботи про міжрівневе поглинання світла, що зумовлене переходами за участю поверхневих станів різної природи (поверхнева поляризаційна пастка і поверхневі деформаційні стани).
4. Показано, що у літературі відома лише теорія поглинання світла квантовими точками з акцепторною або донорною домішкою без урахування поверхневих поляризаційних пасток та поверхневих локальних деформаційних потенціальних ям на межі квантова точка-матриця.

Як видно з представленого огляду робіт, які стосуються теорії поглинання світла квантовими точками, не з'ясованими залишаються питання про вплив домішок (акцепторних, донорних), поверхневих поляризаційних пасток та локальних деформаційних потенціальних ям на межі квантова точка-матриця на електрон-діркові рівні та спектральний коефіцієнт поглинання квантових точок. Саме розв'язок цих задач приведений у дисертаційній роботі [1\*-10\*].

**РОЗДІЛ 2**  
**МІЖРІВНЕВЕ АКЦЕПТОРНЕ ПОГЛИНАННЯ ЕЛЕКТРОМАГНІТНИХ**  
**ХВИЛЬ КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ *CdSe* З АКЦЕПТОРНИМИ**  
**ДОМІШКАМИ**

**2.1. Гамільтоніан моделі квантової точки з двома акцепторними**  
**домішками**

Розглянуто КТ сферичної форми радіусом  $a$ , у якій перебуває два діаметрально розташовані іони акцепторних домішок на відстанях  $D_1$  і  $D_2$  від центру КТ кожна. У моделі взято до уваги валентні зони гетероструктури, які чотирикратно вироджені у центрі зони Бріллюена  $k = 0$ , бо гетероструктура утворена кристалами з великою забороненою зоною та сильною спін-орбітальною взаємодією. У цьому випадку можна знехтувати впливом зони провідності та спін-відщепленої зони. Відлік енергії у валентній зоні ведеться „вниз“ так, що максимум валентної зони трансформується у мінімум. Тоді сферичний гамільтоніан Балдареші-Ліпарі [31] без врахування зон провідності та спін-відщепленої набуде вигляду вигляд [60]:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2} \left( \gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma \right) \mathbf{p}^2 - \gamma (\vec{\mathbf{p}} \cdot \vec{\mathbf{J}})^2 + \Pi(\vec{r}) = \mathbf{H}_0 + W(\vec{r}), \quad (2.1)$$

де  $\gamma_1, \gamma = 1/5(3\gamma_3 + 2\gamma_2)$  – параметри Латтінджера,  $\vec{\mathbf{p}}$  – оператор імпульсу,  $\vec{\mathbf{J}} = i\vec{\mathbf{J}}_x + j\vec{\mathbf{J}}_y + k\vec{\mathbf{J}}_z$  – оператор спінового моменту  $j = 3/2$ . Потенціальна енергія дірки  $\Pi(\vec{r})$  є сумою взаємодії дірки з домішковими іонами  $W(\vec{r})$  та потенціалу конфайменту  $U(r)$ :

$$\Pi(\vec{r}) = W(\vec{r}) + U(r). \quad (2.2)$$

Взаємодію дірки з іонами акцепторних домішок подано у вигляді кулонівської взаємодії двох точкових зарядів:

$$W(\vec{r}) = -\frac{e^2}{\varepsilon|\vec{r} - \vec{D}_1|} - \frac{e^2}{\varepsilon|\vec{r} - \vec{D}_2|} + \frac{e^2}{\varepsilon|\vec{D}_1 - \vec{D}_2|}, \quad (2.3)$$

де  $\varepsilon$  – діелектрична проникність КТ,  $\vec{D}_1 = (0, 0, D_1)$ ,  $\vec{D}_2 = (0, 0, -D_2)$ . Розглядається гетеросистема з великим розривом зон (наприклад,  $CdSe/SiO_2$ ). Тому потенціальну енергію, що задає потенціал обмеження для дірки, подано вигляді нескінченно глибокої сферично-симетричної потенціальної ями:

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r < a, \\ \infty, & r \geq a. \end{cases} \quad (2.4)$$

Точні аналітичні розв'язки рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (1.1) знайти не можна. Відповідне рівняння Шредінгера можна аналітично розв'язати з гамільтоніаном  $\mathbf{H}_0$ . Тоді загальний вигляд хвильових функцій має вигляд [60]:

$$\psi_{f,M}^{(0)}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{2f+1} \sum_{l=f-j}^{f+j} (-1)^{l-j+M} R_f^l(r) \sum_{m_l} \sum_{m_j} \begin{pmatrix} l & j & f \\ m_l & m_j & -M \end{pmatrix} Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi_{m_j}, \quad (2.5)$$

де  $\hbar^2 f(f+1)$ ,  $\hbar^2 l(l+1)$ ,  $\hbar M$ ,  $\hbar m$ ,  $\hbar m_j$  є власними значеннями операторів кутових моментів  $\mathbf{F}^2$ ,  $\mathbf{L}^2$ ,  $\mathbf{F}_z$ ,  $\mathbf{L}_z$ ,  $\mathbf{J}_z$  відповідно,  $\vec{\mathbf{F}} = \vec{\mathbf{L}} + \vec{\mathbf{S}}$   $\chi_{m_j}$  – чотирикомпонентні спінові функції,  $Y_{l,m}$  – сферичні функції, які є власними функціями оператора  $\mathbf{L}^2$ ,  $\begin{pmatrix} l & j & f \\ m_l & m_j & -M \end{pmatrix}$  – 3- $j$  символи Вігнера. На основі загальної функції (2.5) у роботах [61-62] для сферично-симетричного поля отримано розв'язки трьох типів станів:

$$\begin{cases} \psi_{f,M}^{I,(0)} = R_f^{f-3/2}(r) \Phi_{f,M}^{f-3/2}(\theta, \varphi) + R_f^{f+1/2}(r) \Phi_{f,M}^{f+1/2}(\theta, \varphi), & f \geq 3/2, (l = f - 3/2, f + 1/2), \\ \psi_{f,M}^{II,(0)} = R_f^{f-1/2}(r) \Phi_{f,M}^{f-1/2}(\theta, \varphi) + R_f^{f+3/2}(r) \Phi_{f,M}^{f+3/2}(\theta, \varphi), & f \geq 3/2, (l = f - 1/2, f + 3/2), \\ \psi_{f,M}^{III,(0)} = R_{1/2}^l(r) \Phi_{1/2,M}^l(\theta, \varphi), & f = 1/2, (l = 1, 2), \end{cases} \quad (2.6)$$

де  $\Phi_{f,M}^l(\theta, \varphi)$  – чотирикомпонентні спінори, що відповідають спіну  $j = 3/2$ .

Тоді після підстановки (2.6) у рівняння Шредінгера з гамільтоніаном  $\mathbf{H}_0$  отримано радіальні рівняння, які подано у вигляді матричного рівняння:

$$\frac{\hbar^2}{2}\gamma_1 \begin{pmatrix} -(1+C_1)\Delta_l & C_2\mathbf{B}_{l+1}^-\mathbf{B}_{l+2}^- \\ C_2\mathbf{B}_{l+1}^+\mathbf{B}_l^+ & -(1+C_3)\Delta_{l+2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_2^i(r) \\ R_1^i(r) \end{pmatrix} + U(r) \begin{pmatrix} R_2^i(r) \\ R_1^i(r) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} R_2^i(r) \\ R_1^i(r) \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

де  $i = I, II$ ,  $R_1^i = \{R_f^{f+1/2}, R_f^{f+3/2}\}$ ,  $R_2^i = \{R_f^{f-3/2}, R_f^{f-1/2}\}$  відповідно, а коефіцієнти у цьому рівнянні подано за допомогою 6-ї символів:

$$C_1 = C_1(f, l) = \mu\sqrt{5}(-1)^{3/2+l+f} \begin{Bmatrix} l & l & 2 \\ 3/2 & 3/2 & f \end{Bmatrix} \sqrt{\frac{2l(2l+1)(2l+2)}{(2l+3)(2l-1)}},$$

$$C_2 = C_2(f, l) = \mu\sqrt{30}(-1)^{3/2+l+f} \begin{Bmatrix} l+2 & l & 2 \\ 3/2 & 3/2 & f \end{Bmatrix} \sqrt{\frac{(l+1)(l+2)}{2l+3}},$$

$$C_3 = -C_1, \quad (C_1)^2 + (C_2)^2 = \mu^2, \quad C_2/\mu > 0, \quad \mu = \frac{2\gamma}{\gamma_1}.$$

Оператори у рівнянні (2.7) визначаються такими співвідношеннями:

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

Квантові числа  $f, l$  у коефіцієнтах та у рівнянні (2.7) задаватимуть стани I чи II тип станів відповідно до (2.6). Для III типу станів, то зважаючи на те, що у хвильову функцію входить один спінор (2.6), одержано одне рівняння:

$$-\frac{\hbar^2}{2}\gamma_1(1+\mu)(\Delta_l R_{l/2}^l) + U(r)R_{l/2}^l = ER_{l/2}^l. \quad (2.8)$$

Для зручності запису формул перейдено до системи одиниць, де енергія вимірюється в одиницях ефективної енергії Рідберга ( $Ry^* = 13.6\varepsilon^2\gamma_1 \text{ eV}$ ), а відстані — в одиницях ефективного радіуса Бора ( $a_b^* = 0.53\varepsilon_1\gamma_1 \text{ \AA}$ ). Рівняння (2.7)-(2.8) мають точні розв'язки у КТ, які можна подати за допомогою сферичних функцій Бесселя першого роду:



$$\begin{pmatrix} R_2^i \\ R_1^i \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} \frac{-C_2}{1+C_1-(1+\mu)} j_l \left( \chi \sqrt{(1-\mu)} \frac{r}{a} \right) \\ j_{l+2} \left( \chi \sqrt{(1-\mu)} \frac{r}{a} \right) \end{pmatrix} + A_2 \begin{pmatrix} \frac{-C_2}{1+C_1-(1-\mu)} j_l \left( \chi \sqrt{(1+\mu)} \frac{r}{a} \right) \\ j_{l+2} \left( \chi \sqrt{(1+\mu)} \frac{r}{a} \right) \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

де  $i = I, II$  (тип станів визначає набір квантових чисел),

$R_1^i = \{R_f^{f+1/2}, R_f^{f+3/2}\}$ ,  $R_2^i = \{R_f^{f-3/2}, R_f^{f-1/2}\}$  відповідно. Для третього типу

станів розв'язок можна подати за допомогою однієї сферичної функції Бесселя.

$$R_{1/2}^I = A_3 j_l(kr/a), \quad (2.10)$$

де  $k/a = \sqrt{\frac{2}{(1+\mu)} E^{(0)}}$ .

На основі граничних умов для моделі з нескінченним розривом зон (рівність нулю хвильової функції на межі) одержано дисперсійне рівняння, з якого знайдено параметр  $\chi_{f,l,n}$  та  $k_{f,l,n}$ , де  $n$  – номер розв'язку дисперсійного рівняння при фіксованих інших квантових числах. Таким чином знайдено хвильові функції та енергію дірки у сферичній КТ:

$$E_{f,l,n}^{(0)} = \left( \frac{\chi_{f,l,n}}{a} \right)^2 (1 - \mu^2). \quad (2.11)$$

Оскільки енергія дірки залежить ще від двох квантових чисел, то функції (2.6)

слід перепозначити  $\psi_{f,M}^{I,(0)} = \psi_{f,M;n,l}^{I,(0)}$ ;  $\psi_{f,M}^{II,(0)} = \psi_{f,M;n,l}^{II,(0)}$ ;  $\psi_{f,M}^{III,(0)} = \psi_{f,M;n,l}^{III,(0)}$ .

Щоб розв'язати рівняння Шредінгера для початкової задачі з гамільтоніаном (2.1), невідому хвильову функцію можна розкласти за повною системою функцій (2.5):

$$\Psi = \sum_i c_i \psi_i^0, \quad (2.12)$$

де  $\psi_i^0$  – хвильова функція дірки у КТ без домішок. Індексом  $i$  позначено сукупність квантових чисел, що визначають стан дірки. Підстановкою (2.12) у

рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (2.1) та домножуванням на ермітово спряжену функцію  $(\psi_j^0)^+$  отримано лінійну однорідну систему рівнянь відносно коефіцієнтів розкладу:

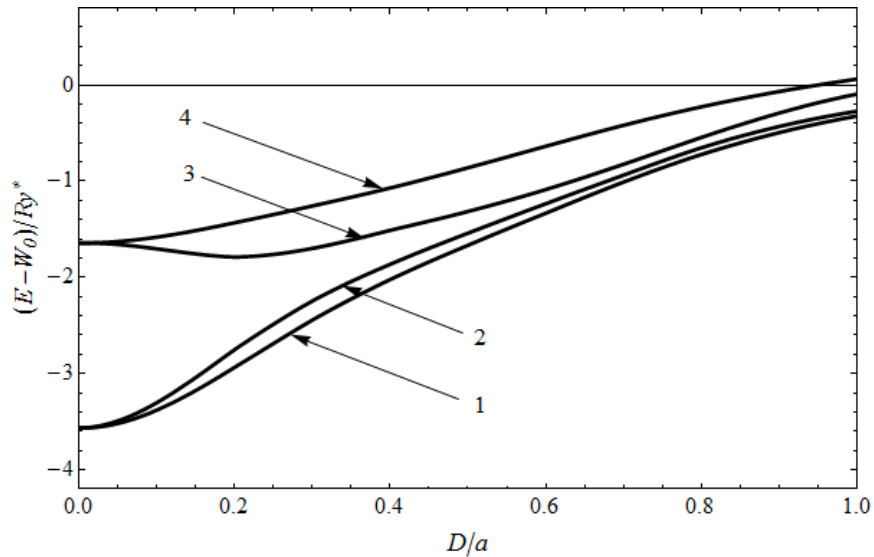
$$\sum_i \left( (E_i^0 - E) \delta_{ji} + W_{ji} \right) c_i = 0, \quad (2.13)$$

де  $W_{ji}$  — матричний елемент потенціальної енергії (2.3) на функціях задачі без домішок. З цієї системи рівнянь й умови нормування  $\sum_i |c_i|^2 = 1$  знайдено енергетичний спектр дірки у полі двох акцепторних домішок та коефіцієнти розкладу, а отже і повну хвильову функцію. Точність значень енергії та безпосередній вигляд хвильових функцій залежить від кількості доданків у розкладі (2.13), тобто порядку визначника (2.13). Через те було використано процедуру знаходження розв'язків кількома етапами, послідовно збільшуючи кількість доданків розкладу. Результати кожного наступного етапу порівнювалися з попередніми. Збільшення порядку припинялося за умови, що похибка в енергії становить менше 2%. Наприклад, для радіуса КТ 25Å результати виходили на необхідну точність, якщо обчислення проводилися з визначником 68x68, коли квантові числа  $f \leq 7/2, l \leq 2, n \leq 4, -f \leq M \leq f$ .

## 2.2. Енергетичний спектр дірки у квантовій точці з двома акцепторними домішками

Числові розрахунки проведено для квантових точок *CdSe* сферичної форми. При обчисленні використано такі параметри:  $E_g = 1.841 \text{ eV}$ ,  $\Delta = 0.420 \text{ eV}$ ,  $\gamma_1 = 1.66$ ,  $\gamma = 0.41$ ,  $\varepsilon = 9.53$  [63-66]. Якщо ж в обчисленнях відкинути два останні доданки з (2.3), які описують взаємодію дірки з другим іоном домішки, то можна отримати результати, що опубліковані у статті [66]. Як у цій, так і у зазначеній роботі зміщення домішок від центра КТ спричинює розщеплення вироджених за магнітним квантовим числом. Кількість рівнів, на які розщеплюється зазначений рівень відповідає значенням  $|M|$ . Оскільки для основного стану  $M = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$ , то енергетичний рівень основного стану, що є чотирикратно виродженим у випадку центральної домішки, розщепиться на два. Схожі розщеплення енергетичних рівнів було отримано і для донорної домішки [15]. Однак у зв'язку з тим, що основний стан донорної домішки не вироджений в однозонній моделі, то відповідно енергетичний рівень основного стану не розщеплюється, на відміну від акцепторної домішки. Ця особливість відрізняє спектр акцепторної домішки в рамках запропонованої моделі від спектру донорної домішки в рамках простої параболічної зони.

На рис.2.1 зображено графік залежності енергії основного та збуджених станів дірки у КТ з двома іонами акцепторних домішок, що розташовані діаметрально, на відстані  $D$  до центра КТ. З графіка видно, що основний енергетичний рівень дірки при зміщенні домішок від центру КТ розщеплюється на два вироджених рівня з  $|M| = 3/2$  (крива 1) і з  $|M| = 1/2$  (крива 2). Причину такої залежності від  $|M|$  можна пояснити порушенням сферичної симетрії задачі та збереженням циліндричної симетрії. Збуджений стан також розщеплюється —  $|M| = 3/2$  (крива 3) і з  $|M| = 1/2$  (крива 4).



**Рисунок. 2.1.** *Енергія дірки у КТ з двома діаметрально розташованими іонами акцепторних домішок у сферичній КТ як функція їх розташування,  $W_0 = e^2 / (\varepsilon |\bar{D}_2 - \bar{D}_1|)$ . Крива 1 – енергія стану  $\psi_{3/2,M;1,0}^I$  з  $M = \pm 3/2$ , крива 2 –  $\psi_{3/2,M;1,0}^I$  з  $M = \pm 1/2$ , крива 3 –  $\psi_{3/2,M;1,1}^{II}$  з  $M = \pm 3/2$ , крива 4 –  $\psi_{3/2,M;1,1}^{II}$  з  $M = \pm 1/2$ . Радіус КТ  $a = 25 \text{ \AA}$*

У граничному випадку, коли обидва іони наближаються до центру КТ, отримуються значення енергії, що відповідає енергії водневоподібної акцепторної домішки з зарядом іона  $-2|e|$ . На відміну від випадку одного йона акцептора, два спричиняють менше розщеплення діркових енергетичних рівнів для основного стану та більше – для збудженого. Відповідно це все відобразиться на смугах міжрівневого поглинання світла.

Зважаючи на зазначене вище розщеплення, хвильову функцію дірки у випадку присутності йонів акцепторних домішок позначено  $\Psi_{1,M}$ , що відповідає основному стану та  $\Psi_{2,M}$  – збудженому.

### 2.3. Поглинання електромагнітних хвиль квантовими точками різних розмірів з двома іонами акцепторних домішок

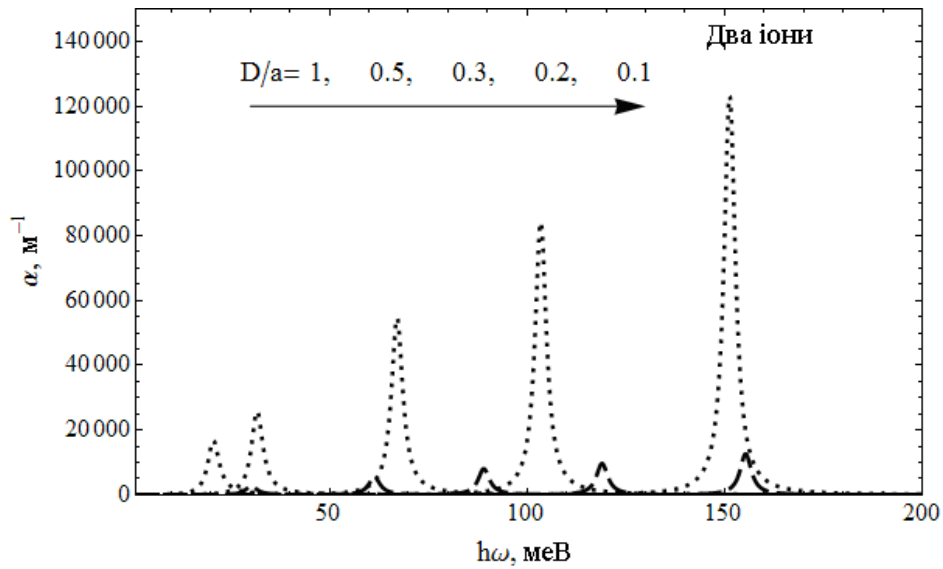
Розглядається КТ з двома іонами акцепторних домішок, на яку напрямлено лінійно поляризоване світло вздовж осі  $z$ . Міжрівневі дипольні переходи дірки за наявності іонів акцепторних домішок обчислено на основі хвильових функцій (2.12). У дипольному наближенні визначено матричні елементи дипольного моменту міжрівневих переходів дірки. Аналіз зазначених матричних елементів показав, що  $d_{1,-3/2;2,-3/2} \neq 0 (\Psi_{1,-3/2} \leftrightarrow \Psi_{2,-3/2})$ ,  $d_{1,3/2;2,3/2} \neq 0 (\Psi_{1,3/2} \leftrightarrow \Psi_{2,3/2})$ ;  $d_{1,-1/2;2,-1/2} \neq 0 (\Psi_{1,-1/2} \leftrightarrow \Psi_{2,-1/2})$ ,  $d_{1,1/2;2,1/2} \neq 0 (\Psi_{1,1/2} \leftrightarrow \Psi_{2,1/2})$ ,  $|d_{1,-3/2;2,-3/2}|^2 = |d_{1,3/2;2,3/2}|^2$ ,  $|d_{1,-1/2;2,-1/2}|^2 = |d_{1,1/2;2,1/2}|^2$ , тобто можливі переходи між станами з однаковим  $M$ .

Спектральний коефіцієнт поглинання світла, що зумовлене міжрівневими переходами дірки, обчислено на основі формули з [48-50]:

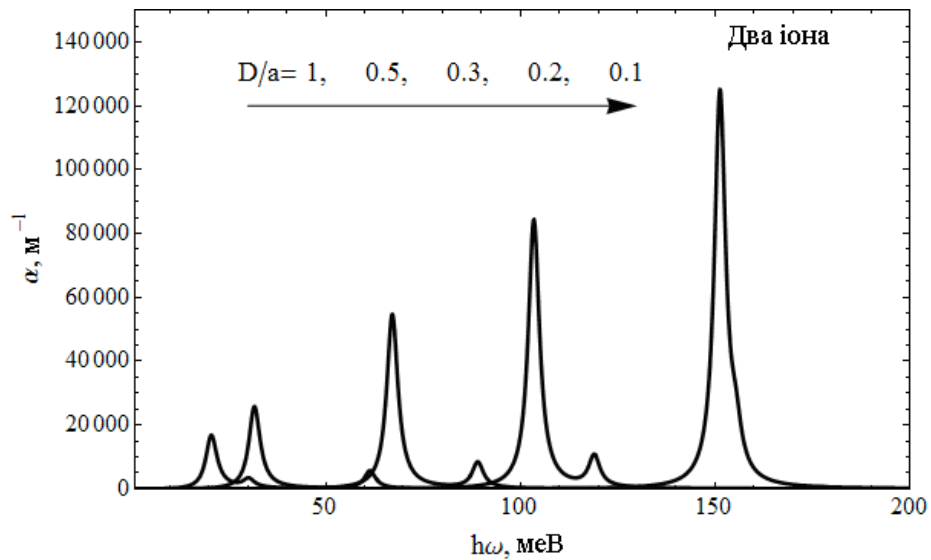
$$\alpha_{1,|M|;2,|M|}(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0 \varepsilon}} \frac{N \left( |d_{1,|M|;2,|M|}|^2 + |d_{1,-|M|;2,-|M|}|^2 \right) \hbar \Gamma}{(E_{2,|M|} - E_{1,|M|} - \hbar \omega)^2 + (\hbar \Gamma)^2}, \quad (2.14)$$

де  $\omega$  – частота падаючої електромагнітної хвилі,  $\varepsilon_0$  – електрична стала,  $\mu_0$  – магнітна стала,  $\varepsilon$  – діелектрична проникність КТ,  $\hbar \Gamma$  – енергія релаксації, що зумовлена електрон-фононою взаємодією та іншими факторами розсіяння,  $|M|=1/2; 3/2$ .  $N$  – концентрація КТ у матриці.  $E_{i,|M|}$  – енергія, що відповідає стану  $\Psi_{i,M}$ . Розглядаються КТ з ідеальною поверхнею при низьких температурах, саме тому параметр  $\hbar \Gamma$  можна оцінити як ширину енергетичних рівнів, величина яких зумовлена розсіюванням на акустичних фонах. Якщо розглянути температуру системи  $T \approx 20K$ , то  $\hbar \Gamma = 1.7 \text{ меВ}$ .

*Залежність коефіцієнта поглинання від енергії падаючого кванта, а також розташування домішок подано на рис.2.2–2.3*



*Рисунок 2.2 Коефіцієнт поглинання світла, що зумовлене міжрівневими переходами дірки, для КТ розміром  $a=25 \text{ \AA}$ . Штрихові криві задають  $\alpha_{1,1/2;2,1/2}$ , пунктирні —  $\alpha_{1,3/2;2,3/2}$*



*Рисунок 2.3. Сумарний коефіцієнт поглинання світла що зумовлене міжрівневими переходами дірки, для КТ розміром  $a=25 \text{ \AA}$ .*

Аналіз графіків показує, що поглинання світла між станами з  $|M|=1/2$  є

меншим, ніж з  $|M|=3/2$ . Також встановлено, що поглинання світла КТ з двома іонами акцепторів відбувається інтенсивніше, ніж з одним (піки поглинання вищі). Причиною такої залежності спектрального коефіцієнта поглинання від відстані між іонами є залежність матричного елемента дипольного моменту міжрівневих переходів. Також видно, що зміщення іонів домішок від центра КТ веде до зміщення відповідних смуг поглинання у низькоенергетичну область. Аналогічні результати отримано у КТ з донорною домішкою [15]. Причиною зміщення смуг поглинання є зближення відповідних енергетичних рівнів при віддаленні іонів від центра КТ. Як і для випадку одного акцептора, який розмішений не у центрі КТ, так і для двох акцепторів врахування складної структури валентної зони для дірки зумовлює появу складної «структури» спектра поглинання. Саме цим можна відрізнити дорні домішки від акцепторних у КТ.

## Висновки до розділу 2

У цьому розділі проведено теоретичне дослідження енергетичного спектру КТ з двома домішками та спектрального коефіцієнта поглинання світла у КТ залежно від відстані між іонами акцепторних домішок у наближенні чотиризонної сферичної моделі Балдареші-Ліпарі. У межах цього дослідження:

1. Розраховано енергію дірки в залежності від геометричного положення домішок у КТ. Показано, що має місце розщеплення рівнів, зумовлене пониженням симетрії за рахунок нецентрального положення домішок у квантовій точці.
2. Встановлено часткове зняття виродження енергетичних рівнів дірки у сферичній квантовій точці з акцепторними домішками за магнітним квантовим числом  $M$ , зумовлене пониженням симетрії кристалічної ґратки квантової точки.
3. Розраховано коефіцієнт поглинання світла у КТ з двома акцепторами, і показано, що з віддаленням домішок від центра квантової точки смуга спектрального коефіцієнта поглинання зміщується у низькоенергетичну область.
4. Порівняльний аналіз спектрального коефіцієнта поглинання квантової точки з нецентральною донорною та акцепторною домішками показав, що в обох випадках віддалення домішок від центра КТ зміщує смуги поглинання у низькоенергетичну область. Відмінність у смугах поглинання полягає у тому, що для КТ з двома акцепторами існують дві смуги поглинання за рахунок розщеплення рівнів, зумовлених пониженням симетрії кристалічної ґратки квантової точки.



**РОЗДІЛ 2**  
**МІЖРІВНЕВЕ АКЦЕПТОРНЕ ПОГЛИНАННЯ ЕЛЕКТРОМАГНІТНИХ**  
**ХВИЛЬ КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ *CdSe* З АКЦЕПТОРНИМИ**  
**ДОМІШКАМИ**

**2.1. Гамільтоніан моделі квантової точки з двома акцепторними**  
**домішками**

Розглянуто КТ сферичної форми радіусом  $a$ , у якій перебуває два діаметрально розташовані іони акцепторних домішок на відстанях  $D_1$  і  $D_2$  від центру КТ кожна. У моделі взято до уваги валентні зони гетероструктури, які чотирикратно вироджені у центрі зони Бріллюена  $k = 0$ , бо гетероструктура утворена кристалами з великою забороненою зоною та сильною спін-орбітальною взаємодією. У цьому випадку можна знехтувати впливом зони провідності та спін-відщепленої зони. Відлік енергії у валентній зоні ведеться „вниз“ так, що максимум валентної зони трансформується у мінімум. Тоді сферичний гамільтоніан Балдареші-Ліпарі [31] без врахування зон провідності та спін-відщепленої набуде вигляду вигляд [60]:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2} \left( \gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma \right) \mathbf{p}^2 - \gamma (\vec{\mathbf{p}} \cdot \vec{\mathbf{J}})^2 + \Pi(\vec{r}) = \mathbf{H}_0 + W(\vec{r}), \quad (2.1)$$

де  $\gamma_1, \gamma = 1/5(3\gamma_3 + 2\gamma_2)$  – параметри Латтінджера,  $\vec{\mathbf{p}}$  – оператор імпульсу,  $\vec{\mathbf{J}} = i\vec{\mathbf{J}}_x + j\vec{\mathbf{J}}_y + k\vec{\mathbf{J}}_z$  – оператор спінового моменту  $j = 3/2$ . Потенціальна енергія дірки  $\Pi(\vec{r})$  є сумою взаємодії дірки з домішковими іонами  $W(\vec{r})$  та потенціалу конфайменту  $U(r)$ :

$$\Pi(\vec{r}) = W(\vec{r}) + U(r). \quad (2.2)$$

Взаємодію дірки з іонами акцепторних домішок подано у вигляді кулонівської взаємодії двох точкових зарядів:

$$W(\vec{r}) = -\frac{e^2}{\varepsilon|\vec{r} - \vec{D}_1|} - \frac{e^2}{\varepsilon|\vec{r} - \vec{D}_2|} + \frac{e^2}{\varepsilon|\vec{D}_1 - \vec{D}_2|}, \quad (2.3)$$

де  $\varepsilon$  – діелектрична проникність КТ,  $\vec{D}_1 = (0, 0, D_1)$ ,  $\vec{D}_2 = (0, 0, -D_2)$ . Розглядається гетеросистема з великим розривом зон (наприклад,  $CdSe/SiO_2$ ). Тому потенціальну енергію, що задає потенціал обмеження для дірки, подано вигляді нескінченно глибокої сферично-симетричної потенціальної ями:

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r < a, \\ \infty, & r \geq a. \end{cases} \quad (2.4)$$

Точні аналітичні розв'язки рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (1.1) знайти не можна. Відповідне рівняння Шредінгера можна аналітично розв'язати з гамільтоніаном  $\mathbf{H}_0$ . Тоді загальний вигляд хвильових функцій має вигляд [60]:

$$\psi_{f,M}^{(0)}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{2f+1} \sum_{l=f-j}^{f+j} (-1)^{l-j+M} R_f^l(r) \sum_{m_l} \sum_{m_j} \begin{pmatrix} l & j & f \\ m_l & m_j & -M \end{pmatrix} Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi_{m_j}, \quad (2.5)$$

де  $\hbar^2 f(f+1)$ ,  $\hbar^2 l(l+1)$ ,  $\hbar M$ ,  $\hbar m$ ,  $\hbar m_j$  є власними значеннями операторів кутових моментів  $\mathbf{F}^2$ ,  $\mathbf{L}^2$ ,  $\mathbf{F}_z$ ,  $\mathbf{L}_z$ ,  $\mathbf{J}_z$  відповідно,  $\vec{\mathbf{F}} = \vec{\mathbf{L}} + \vec{\mathbf{S}}$   $\chi_{m_j}$  – чотирикомпонентні спінові функції,  $Y_{l,m}$  – сферичні функції, які є власними функціями оператора  $\mathbf{L}^2$ ,  $\begin{pmatrix} l & j & f \\ m_l & m_j & -M \end{pmatrix}$  – 3- $j$  символи Вігнера. На основі загальної функції (2.5) у роботах [61-62] для сферично-симетричного поля отримано розв'язки трьох типів станів:

$$\begin{cases} \psi_{f,M}^{I,(0)} = R_f^{f-3/2}(r) \Phi_{f,M}^{f-3/2}(\theta, \varphi) + R_f^{f+1/2}(r) \Phi_{f,M}^{f+1/2}(\theta, \varphi), & f \geq 3/2, (l = f - 3/2, f + 1/2), \\ \psi_{f,M}^{II,(0)} = R_f^{f-1/2}(r) \Phi_{f,M}^{f-1/2}(\theta, \varphi) + R_f^{f+3/2}(r) \Phi_{f,M}^{f+3/2}(\theta, \varphi), & f \geq 3/2, (l = f - 1/2, f + 3/2), \\ \psi_{f,M}^{III,(0)} = R_{1/2}^l(r) \Phi_{1/2,M}^l(\theta, \varphi), & f = 1/2, (l = 1, 2), \end{cases} \quad (2.6)$$

де  $\Phi_{f,M}^l(\theta, \varphi)$  – чотирикомпонентні спінори, що відповідають спіну  $j = 3/2$ .

Тоді після підстановки (2.6) у рівняння Шредінгера з гамільтоніаном  $\mathbf{H}_0$  отримано радіальні рівняння, які подано у вигляді матричного рівняння:

$$\frac{\hbar^2}{2}\gamma_1 \begin{pmatrix} -(1+C_1)\Delta_l & C_2\mathbf{B}_{l+1}^-\mathbf{B}_{l+2}^- \\ C_2\mathbf{B}_{l+1}^+\mathbf{B}_l^+ & -(1+C_3)\Delta_{l+2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_2^i(r) \\ R_1^i(r) \end{pmatrix} + U(r) \begin{pmatrix} R_2^i(r) \\ R_1^i(r) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} R_2^i(r) \\ R_1^i(r) \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

де  $i = I, II$ ,  $R_1^i = \{R_f^{f+1/2}, R_f^{f+3/2}\}$ ,  $R_2^i = \{R_f^{f-3/2}, R_f^{f-1/2}\}$  відповідно, а коефіцієнти у цьому рівнянні подано за допомогою 6-ї символів:

$$C_1 = C_1(f, l) = \mu\sqrt{5}(-1)^{3/2+l+f} \begin{Bmatrix} l & l & 2 \\ 3/2 & 3/2 & f \end{Bmatrix} \sqrt{\frac{2l(2l+1)(2l+2)}{(2l+3)(2l-1)}},$$

$$C_2 = C_2(f, l) = \mu\sqrt{30}(-1)^{3/2+l+f} \begin{Bmatrix} l+2 & l & 2 \\ 3/2 & 3/2 & f \end{Bmatrix} \sqrt{\frac{(l+1)(l+2)}{2l+3}},$$

$$C_3 = -C_1, \quad (C_1)^2 + (C_2)^2 = \mu^2, \quad C_2/\mu > 0, \quad \mu = \frac{2\gamma}{\gamma_1}.$$

Оператори у рівнянні (2.7) визначаються такими співвідношеннями:

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

Квантові числа  $f, l$  у коефіцієнтах та у рівнянні (2.7) задаватимуть стани I чи II тип станів відповідно до (2.6). Для III типу станів, то зважаючи на те, що у хвильову функцію входить один спінор (2.6), одержано одне рівняння:

$$-\frac{\hbar^2}{2}\gamma_1(1+\mu)(\Delta_l R_{l/2}^l) + U(r)R_{l/2}^l = ER_{l/2}^l. \quad (2.8)$$

Для зручності запису формул перейдено до системи одиниць, де енергія вимірюється в одиницях ефективної енергії Рідберга ( $Ry^* = 13.6\varepsilon^2\gamma_1 \text{ eV}$ ), а відстані — в одиницях ефективного радіуса Бора ( $a_b^* = 0.53\varepsilon_1\gamma_1 \text{ \AA}$ ). Рівняння (2.7)-(2.8) мають точні розв'язки у КТ, які можна подати за допомогою сферичних функцій Бесселя першого роду:

$$\begin{pmatrix} R_2^i \\ R_1^i \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} \frac{-C_2}{1+C_1-(1+\mu)} j_l \left( \chi \sqrt{(1-\mu)} \frac{r}{a} \right) \\ j_{l+2} \left( \chi \sqrt{(1-\mu)} \frac{r}{a} \right) \end{pmatrix} + A_2 \begin{pmatrix} \frac{-C_2}{1+C_1-(1-\mu)} j_l \left( \chi \sqrt{(1+\mu)} \frac{r}{a} \right) \\ j_{l+2} \left( \chi \sqrt{(1+\mu)} \frac{r}{a} \right) \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

де  $i = I, II$  (тип станів визначає набір квантових чисел),

$R_1^i = \{R_f^{f+1/2}, R_f^{f+3/2}\}$ ,  $R_2^i = \{R_f^{f-3/2}, R_f^{f-1/2}\}$  відповідно. Для третього типу

станів розв'язок можна подати за допомогою однієї сферичної функції Бесселя.

$$R_{1/2}^I = A_3 j_l(kr/a), \quad (2.10)$$

де  $k/a = \sqrt{\frac{2}{(1+\mu)} E^{(0)}}$ .

На основі граничних умов для моделі з нескінченним розривом зон (рівність нулю хвильової функції на межі) одержано дисперсійне рівняння, з якого знайдено параметр  $\chi_{f,l,n}$  та  $k_{f,l,n}$ , де  $n$  – номер розв'язку дисперсійного рівняння при фіксованих інших квантових числах. Таким чином знайдено хвильові функції та енергію дірки у сферичній КТ:

$$E_{f,l,n}^{(0)} = \left( \frac{\chi_{f,l,n}}{a} \right)^2 (1 - \mu^2). \quad (2.11)$$

Оскільки енергія дірки залежить ще від двох квантових чисел, то функції (2.6)

слід перепозначити  $\psi_{f,M}^{I,(0)} = \psi_{f,M;n,l}^{I,(0)}$ ;  $\psi_{f,M}^{II,(0)} = \psi_{f,M;n,l}^{II,(0)}$ ;  $\psi_{f,M}^{III,(0)} = \psi_{f,M;n,l}^{III,(0)}$ .

Щоб розв'язати рівняння Шредінгера для початкової задачі з гамільтоніаном (2.1), невідому хвильову функцію можна розкласти за повною системою функцій (2.5):

$$\Psi = \sum_i c_i \psi_i^0, \quad (2.12)$$

де  $\psi_i^0$  – хвильова функція дірки у КТ без домішок. Індексом  $i$  позначено сукупність квантових чисел, що визначають стан дірки. Підстановкою (2.12) у

рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (2.1) та домножуванням на ермітово спряжену функцію  $(\psi_j^0)^+$  отримано лінійну однорідну систему рівнянь відносно коефіцієнтів розкладу:

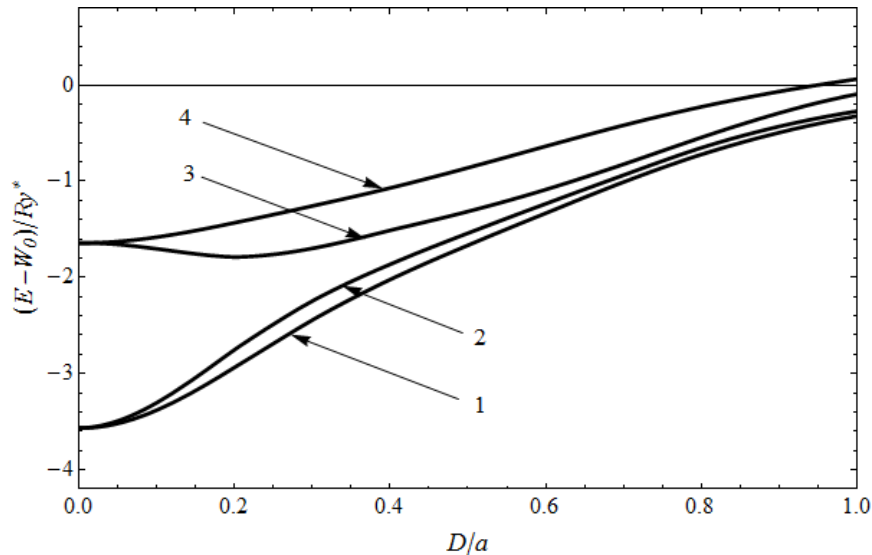
$$\sum_i \left( (E_i^0 - E) \delta_{ji} + W_{ji} \right) c_i = 0, \quad (2.13)$$

де  $W_{ji}$  — матричний елемент потенціальної енергії (2.3) на функціях задачі без домішок. З цієї системи рівнянь й умови нормування  $\sum_i |c_i|^2 = 1$  знайдено енергетичний спектр дірки у полі двох акцепторних домішок та коефіцієнти розкладу, а отже і повну хвильову функцію. Точність значень енергії та безпосередній вигляд хвильових функцій залежить від кількості доданків у розкладі (2.13), тобто порядку визначника (2.13). Через те було використано процедуру знаходження розв'язків кількома етапами, послідовно збільшуючи кількість доданків розкладу. Результати кожного наступного етапу порівнювалися з попередніми. Збільшення порядку припинялося за умови, що похибка в енергії становить менше 2%. Наприклад, для радіуса КТ 25Å результати виходили на необхідну точність, якщо обчислення проводилися з визначником 68x68, коли квантові числа  $f \leq 7/2, l \leq 2, n \leq 4, -f \leq M \leq f$ .

## 2.2. Енергетичний спектр дірки у квантовій точці з двома акцепторними домішками

Числові розрахунки проведено для квантових точок *CdSe* сферичної форми. При обчисленні використано такі параметри:  $E_g = 1.841 \text{ eV}$ ,  $\Delta = 0.420 \text{ eV}$ ,  $\gamma_1 = 1.66$ ,  $\gamma = 0.41$ ,  $\varepsilon = 9.53$  [63-66]. Якщо ж в обчисленнях відкинути два останні доданки з (2.3), які описують взаємодію дірки з другим іоном домішки, то можна отримати результати, що опубліковані у статті [66]. Як у цій, так і у зазначеній роботі зміщення домішок від центра КТ спричинює розщеплення вироджених за магнітним квантовим числом. Кількість рівнів, на які розщеплюється зазначений рівень відповідає значенням  $|M|$ . Оскільки для основного стану  $M = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$ , то енергетичний рівень основного стану, що є чотирикратно виродженим у випадку центральної домішки, розщепиться на два. Схожі розщеплення енергетичних рівнів було отримано і для донорної домішки [15]. Однак у зв'язку з тим, що основний стан донорної домішки не вироджений в однозонній моделі, то відповідно енергетичний рівень основного стану не розщеплюється, на відміну від акцепторної домішки. Ця особливість відрізняє спектр акцепторної домішки в рамках запропонованої моделі від спектру донорної домішки в рамках простої параболічної зони.

На рис.2.1 зображено графік залежності енергії основного та збуджених станів дірки у КТ з двома іонами акцепторних домішок, що розташовані діаметрально, на відстані  $D$  до центра КТ. З графіка видно, що основний енергетичний рівень дірки при зміщенні домішок від центру КТ розщеплюється на два вироджених рівня з  $|M| = 3/2$  (крива 1) і з  $|M| = 1/2$  (крива 2). Причину такої залежності від  $|M|$  можна пояснити порушенням сферичної симетрії задачі та збереженням циліндричної симетрії. Збуджений стан також розщеплюється —  $|M| = 3/2$  (крива 3) і з  $|M| = 1/2$  (крива 4).



**Рисунок. 2.1.** *Енергія дірки у КТ з двома діаметрально розташованими іонами акцепторних домішок у сферичній КТ як функція їх розташування,  $W_0 = e^2 / (\varepsilon |\bar{D}_2 - \bar{D}_1|)$ . Крива 1 – енергія стану  $\psi_{3/2,M;1,0}^I$  з  $M = \pm 3/2$ , крива 2 –  $\psi_{3/2,M;1,0}^I$  з  $M = \pm 1/2$ , крива 3 –  $\psi_{3/2,M;1,1}^{II}$  з  $M = \pm 3/2$ , крива 4 –  $\psi_{3/2,M;1,1}^{II}$  з  $M = \pm 1/2$ . Радіус КТ  $a = 25 \text{ \AA}$*

У граничному випадку, коли обидва іони наближаються до центру КТ, отримуються значення енергії, що відповідає енергії водневоподібної акцепторної домішки з зарядом іона  $-2|e|$ . На відміну від випадку одного йона акцептора, два спричиняють менше розщеплення діркових енергетичних рівнів для основного стану та більше – для збудженого. Відповідно це все відобразиться на смугах міжрівневого поглинання світла.

Зважаючи на зазначене вище розщеплення, хвильову функцію дірки у випадку присутності йонів акцепторних домішок позначено  $\Psi_{1,M}$ , що відповідає основному стану та  $\Psi_{2,M}$  – збудженому.

### 2.3. Поглинання електромагнітних хвиль квантовими точками різних розмірів з двома іонами акцепторних домішок

Розглядається КТ з двома іонами акцепторних домішок, на яку напрямлено лінійно поляризоване світло вздовж осі  $z$ . Міжрівневі дипольні переходи дірки за наявності іонів акцепторних домішок обчислено на основі хвильових функцій (2.12). У дипольному наближенні визначено матричні елементи дипольного моменту міжрівневих переходів дірки. Аналіз зазначених матричних елементів показав, що  $d_{1,-3/2;2,-3/2} \neq 0 (\Psi_{1,-3/2} \leftrightarrow \Psi_{2,-3/2})$ ,  $d_{1,3/2;2,3/2} \neq 0 (\Psi_{1,3/2} \leftrightarrow \Psi_{2,3/2})$ ;  $d_{1,-1/2;2,-1/2} \neq 0 (\Psi_{1,-1/2} \leftrightarrow \Psi_{2,-1/2})$ ,  $d_{1,1/2;2,1/2} \neq 0 (\Psi_{1,1/2} \leftrightarrow \Psi_{2,1/2})$ ,  $|d_{1,-3/2;2,-3/2}|^2 = |d_{1,3/2;2,3/2}|^2$ ,  $|d_{1,-1/2;2,-1/2}|^2 = |d_{1,1/2;2,1/2}|^2$ , тобто можливі переходи між станами з однаковим  $M$ .

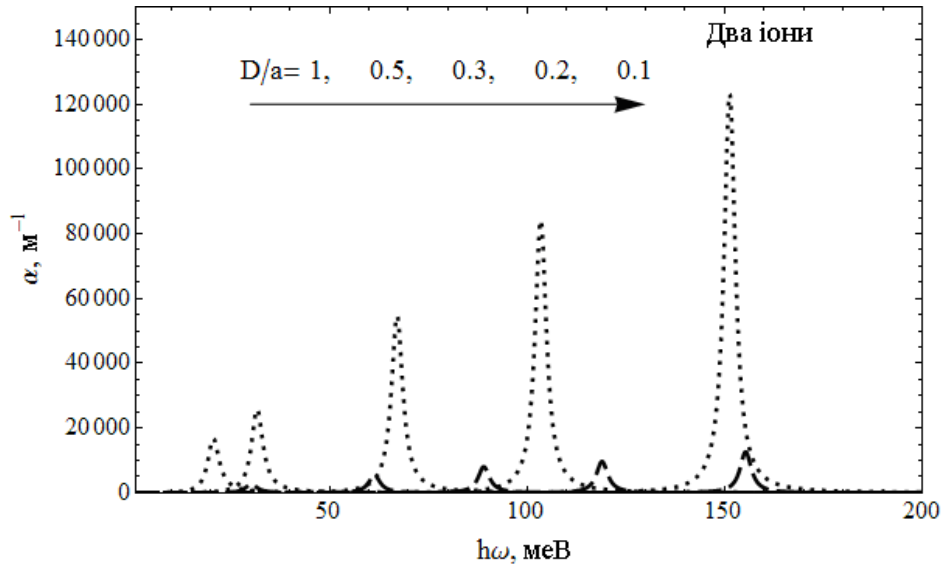
Спектральний коефіцієнт поглинання світла, що зумовлене міжрівневими переходами дірки, обчислено на основі формули з [48-50]:

$$\alpha_{1,|M|;2,|M|}(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0 \varepsilon}} \frac{N \left( |d_{1,|M|;2,|M|}|^2 + |d_{1,-|M|;2,-|M|}|^2 \right) \hbar \Gamma}{(E_{2,|M|} - E_{1,|M|} - \hbar \omega)^2 + (\hbar \Gamma)^2}, \quad (2.14)$$

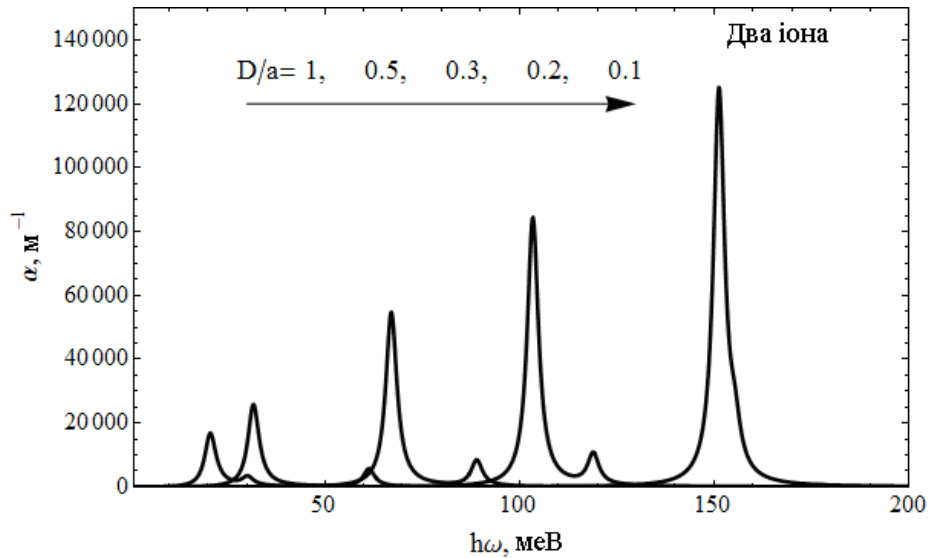
де  $\omega$  – частота падаючої електромагнітної хвилі,  $\varepsilon_0$  – електрична стала,  $\mu_0$  – магнітна стала,  $\varepsilon$  – діелектрична проникність КТ,  $\hbar \Gamma$  – енергія релаксації, що зумовлена електрон-фононою взаємодією та іншими факторами розсіювання,  $|M|=1/2; 3/2$ .  $N$  – концентрація КТ у матриці.  $E_{i,|M|}$  – енергія, що відповідає стану  $\Psi_{i,M}$ . Розглядаються КТ з ідеальною поверхнею при низьких температурах, саме тому параметр  $\hbar \Gamma$  можна оцінити як ширину енергетичних рівнів, величина яких зумовлена розсіюванням на акустичних фонах. Якщо розглянути температуру системи  $T \approx 20K$ , то  $\hbar \Gamma = 1.7 \text{ меВ}$ .

*Залежність коефіцієнта поглинання від енергії падаючого кванта, а також розташування домішок подано на рис.2.2–2.3*





**Рисунок 2.2** Коефіцієнт поглинання світла, що зумовлене міжрівневими переходами дірки, для КТ розміром  $a=25 \text{ \AA}$ . Штрихові криві задають  $\alpha_{1,1/2;2,1/2}$ , пунктирні —  $\alpha_{1,3/2;2,3/2}$



**Рисунок 2.3.** Сумарний коефіцієнт поглинання світла що зумовлене міжрівневими переходами дірки, для КТ розміром  $a=25 \text{ \AA}$ .

Аналіз графіків показує, що поглинання світла між станами з  $|M|=1/2$  є

меншим, ніж з  $|M|=3/2$ . Також встановлено, що поглинання світла КТ з двома іонами акцепторів відбувається інтенсивніше, ніж з одним (піки поглинання вищі). Причиною такої залежності спектрального коефіцієнта поглинання від відстані між іонами є залежність матричного елемента дипольного моменту міжрівневих переходів. Також видно, що зміщення іонів домішок від центра КТ веде до зміщення відповідних смуг поглинання у низькоенергетичну область. Аналогічні результати отримано у КТ з донорною домішкою [15]. Причиною зміщення смуг поглинання є зближення відповідних енергетичних рівнів при віддаленні іонів від центра КТ. Як і для випадку одного акцептора, який розмішений не у центрі КТ, так і для двох акцепторів врахування складної структури валентної зони для дірки зумовлює появу складної «структури» спектра поглинання. Саме цим можна відрізнити дорні домішки від акцепторних у КТ.

## Висновки до розділу 2

У цьому розділі проведено теоретичне дослідження енергетичного спектру КТ з двома домішками та спектрального коефіцієнта поглинання світла у КТ залежно від відстані між іонами акцепторних домішок у наближенні чотиризонної сферичної моделі Балдареші-Ліпарі. У межах цього дослідження:

5. Розраховано енергію дірки в залежності від геометричного положення домішок у КТ. Показано, що має місце розщеплення рівнів, зумовлене пониженням симетрії за рахунок нецентрального положення домішок у квантовій точці.
6. Встановлено часткове зняття виродження енергетичних рівнів дірки у сферичній квантовій точці з акцепторними домішками за магнітним квантовим числом  $M$ , зумовлене пониженням симетрії кристалічної ґратки квантової точки.
7. Розраховано коефіцієнт поглинання світла у КТ з двома акцепторами, і показано, що з віддаленням домішок від центра квантової точки смуга спектрального коефіцієнта поглинання зміщується у низькоенергетичну область.
8. Порівняльний аналіз спектрального коефіцієнта поглинання квантової точки з нецентральною донорною та акцепторною домішками показав, що в обох випадках віддалення домішок від центра КТ зміщує смуги поглинання у низькоенергетичну область. Відмінність у смугах поглинання полягає у тому, що для КТ з двома акцепторами існують дві смуги поглинання за рахунок розщеплення рівнів, зумовлених пониженням симетрії кристалічної ґратки квантової точки.

### РОЗДІЛ 3

## ВПЛИВ ПОВЕРХНЕВОЇ ПОЛЯРИЗАЦІЙНОЇ ПАСТКИ НА ВЛАСТИВОСТІ КВАНТОВОЇ ТОЧКИ З ДОМІШКОЮ

### 3.1. Модель квантової точки з домішкою та поверхневої поляризаційної пастки

Розглядається наногетеросистема, що складається з діелектричної матриці, у яку поміщено сферична КТ з водневоподібною домішкою у її центрі. Електрон характеризується у кожному середовищі своєю ефективною масою ( $m_1^*$ ,  $m_2^*$ ), а кожне середовище описується своєю діелектричною проникністю ( $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$ ).

Сучасна технологія створення наногетеросистем з напівпровідників та діелектриків дає можливість отримувати їх досить високої якості. У реальних умовах важко створити неоднорідну систему зі стрибкоподібною змінною для всіх фізичних параметрів на межі поділу середовищ ( $r \approx a$ ),  $a$  – радіус КТ. Завжди існує перехідний шар, в якому той чи інший фізичний параметр (ефективна маса частинки, діелектрична проникність кристалу) змінюється від його значення в одному кристалі до відповідної величини в іншому.

Нехай біля межі поділу середовищ існує перехідний шар, де діелектрична проникність змінюється від значення  $\epsilon_1$  в КТ до  $\epsilon_2$  у матриці. У цьому випадку можна отримати потенціальну енергію взаємодії заряду з поляризаційними зарядами, які цей заряд індукує, у вигляді [13]:

$$V_p(r) = \frac{e^2 \gamma}{4\epsilon(r)} \int_0^\infty dr_0 \frac{\operatorname{th}\left(\frac{r_0 - a}{L}\right) + \frac{r_0}{L} \operatorname{sech}^2\left(\frac{r_0 - a}{L}\right)}{r_0^2 - r^2}, \quad (3.1)$$

$$\epsilon(r) = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2} \left[ 1 - \gamma \cdot \operatorname{th}\left(\frac{r - a}{L}\right) \right], \quad \gamma = \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}. \quad (3.2)$$

Аналіз проведений на основі формули (3.1) показує що для того, щоб ширина перехідного шару була величиною порядку сталої ґратки  $a_0$ , необхідно, щоб параметр  $L$  задовольняв умові  $L < a_0$ . За умови  $\varepsilon_1 > \varepsilon_2$  у приповерхневій області матриці потенціальна енергія (3.1) має мінімум (рис.3.1), тобто виникає додаткова потенціальна яма (поляризаційна пастка).

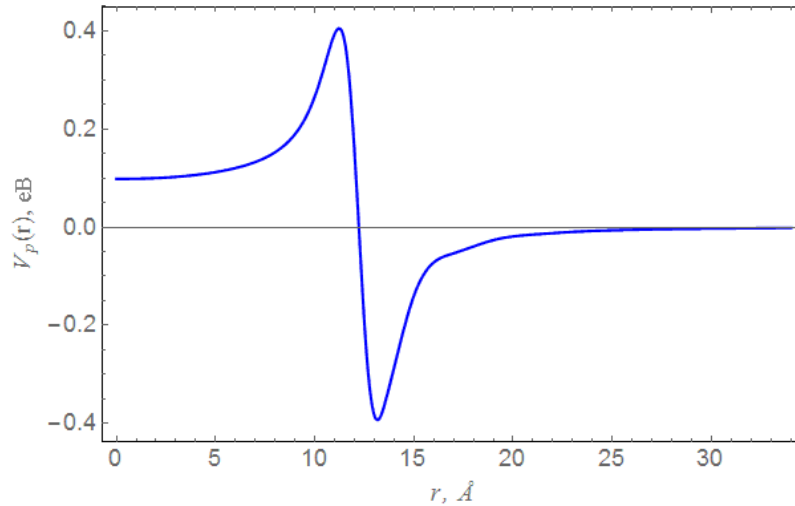


Рисунок.3.1. Потенціальна енергія взаємодії електрона з приповерхневими поляризаційними зарядами (поляризаційна пастка)

Розглянемо електрон у сферичній КТ ( $CdS$ ) радіусом  $a$ , що поміщена у матрицю  $SiO_2$ . Запишемо гамільтоніан такої системи, використовуючи атомну систему одиниць Хартрі ( $m_0 = 1$ ,  $\hbar = 1$ ,  $e = 1$ ):

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= -\frac{1}{2} \nabla \frac{1}{m(r)} \nabla + \Pi(r) = \\
 &= -\frac{1}{2} \nabla \frac{1}{m(r)} \nabla + U(r) + V(r) + V_p(r) \\
 &= \hat{H}^0 + V_p(r) + W_p,
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

де потенціал обмеження вибрано у вигляді:

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a, \\ U_0, & r > a, \end{cases} \quad U_0 > 0, \tag{3.4}$$

а потенціальну енергію взаємодії електрона з поляризаційними зарядами, які цей же електрон індукує записуємо формулою (3.1). Також врахуємо, що іон

домішки взаємодіє з електроном. Потенціальну енергію такої взаємодії отримано на основі точного розв'язку рівняння Пуассона. Її записано у вигляді:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{1}{\varepsilon_1 r} - \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 a}, & r \leq a \\ -\frac{1}{\varepsilon_2 r}, & r > a \end{cases} = \begin{cases} -\frac{1}{\varepsilon_1 r}, & r \leq a \\ -\frac{1}{\varepsilon_2 r}, & r > a \end{cases} + \begin{cases} -\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 a}, & r \leq a \\ 0, & r > a \end{cases} = \begin{cases} -\frac{1}{\varepsilon_1 r}, & r \leq a \\ -\frac{1}{\varepsilon_2 r}, & r > a \end{cases} + W_p. \quad (3.5)$$

Сумарну потенціальну енергію електрона у КТ можна представити графіком (рис. 3.2)

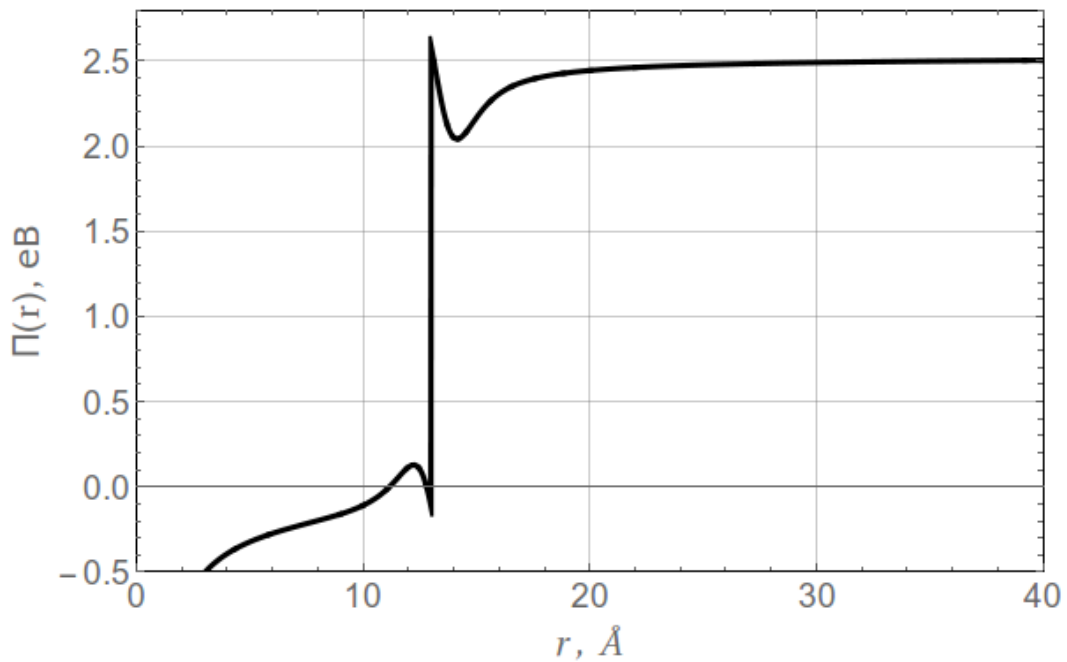


Рисунок 3.2. Сумарна потенціальна енергія електрона у квантовій точці

Рівняння Шредінгера з гамільтоніаном  $\hat{H}^0$  можна розв'язано точно [13]. Розв'язки подано у різних областях зміни координати  $r$ :

$$\psi^{(0)}(r, \Omega) = \begin{cases} \psi_1(r, \Omega), & r \leq a, \\ \psi_2(r, \Omega), & r > a. \end{cases} \quad (3.6)$$

Нехай  $r \leq a$ . Тоді

$$\psi_1(\xi_1, \Omega) = A_1 M_{\lambda, l+1/2}(\xi_1) / \xi_1 \cdot Y_l^m(\Omega), \quad \text{якщо } E < 0, \quad (3.7)$$

де

$$\xi_1 = \alpha_1 r, \quad (\alpha_1)^2 = -8m_1^* E, \quad \lambda_1 = 2m_1^* / (\varepsilon_1 \alpha_1), \text{ M – функція Віттекера, або}$$

$$\psi_1(\xi_1, \Omega) = A_1 F_l(\delta_1, \xi_1) / \xi_1 \cdot Y_l^m(\Omega), \text{ якщо } E > 0, \quad (3.8)$$

де

$$\xi_1 = \beta_1 r, \quad \beta_1^2 = 2m_1^* E, \quad \delta_1 = -m_1^* / (\varepsilon_1 \beta_1), \text{ F – регулярна функція Кулона.}$$

Коли ж  $r > a$ , то

$$\psi_2(\xi_2, \Omega) = D_2 W_{\lambda_2, l+1/2}(\xi_2) / \xi_2 \cdot Y_l^m(\Omega), \quad (3.9)$$

де

$$\xi_2 = \alpha_2 r, \quad (\alpha_2)^2 = -8m_2^* E / \hbar^2, \quad \lambda_2 = 2m_2^* e^2 / (\varepsilon_2 \hbar^2 \alpha_2), \quad E - U_0 < 0,$$

W – функція Віттекера, що прямує до нуля при  $r \rightarrow \infty$ .

Застосовуючи граничні умови та умову нормування, –

$$R_1(r)|_{r=a} - R_2(r)|_{r=a} = 0,$$

$$\frac{1}{m_1^*} \frac{\partial}{\partial r} R_1(r) \Big|_{r=a} - \frac{1}{m_2^*} \frac{\partial}{\partial r} R_2(r) \Big|_{r=a} = 0, \quad (3.10)$$

$$\int d\vec{r} |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 = 1,$$

знаходимо енергетичний спектр електрона домішки та невідомі коефіцієнти у хвильових функціях.

Хвильова функція (3.6) описує розв'язок задачі без врахування приповерхневої поляризаційної пастки. Щоб її врахувати, необхідно хвильову функцію, що є розв'язком рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (3.3), подати у вигляді розкладу по повній системі функцій (3.6):

$$\Psi = \sum_i C_i \psi_i^{(0)}, \quad (3.11)$$

де  $i$  – сукупність квантових чисел  $n, l, m$ . Функцію (3.11) підставляємо у рівняння Шредінгера і домножуємо на ермітово спряжену функцію  $(\psi_j^{(0)})^*$ . У результаті отримуємо систему рівнянь:

$$\sum_i C_i \left[ (E_i^{(0)} - E) \delta_{ji} + \langle \psi_j^{(0)} | V_p + W_p | \psi_j^{(0)} \rangle \right] = 0. \quad (3.12)$$

У системі (3.12) було враховано  $n \leq 4$ ,  $l \leq 3$ ,  $-l \leq m \leq l$ . Формула (3.12) – лінійна однорідна система рівнянь. З умови нетривіальності системи (рівність визначника відносно  $C_i$  нулю) визначено енергію системи. Додаючи до системи (3.12) умову нормування, знаходимо  $C_i$ . Отже, отримано енергії системи та хвильові функції, які чисельно розраховані та проаналізовані у наступному параграфі цього розділу.



### 3.2. Розрахунок енергетичного спектру електрона у квантовій точці з допоруною домішкою

Конкретні обчислення проведено для гетеросистеми  $CdS/SiO_2$ . Результати обчислення енергії допорукового електрона в станах s-, p-, d-станах подано на рис.3.3. Видно, що для кожного стану існує діапазон розмірів КТ, при яких зменшення радіуса КТ супроводжується монотонним зростанням енергії електрона через розмірне квантування її руху.

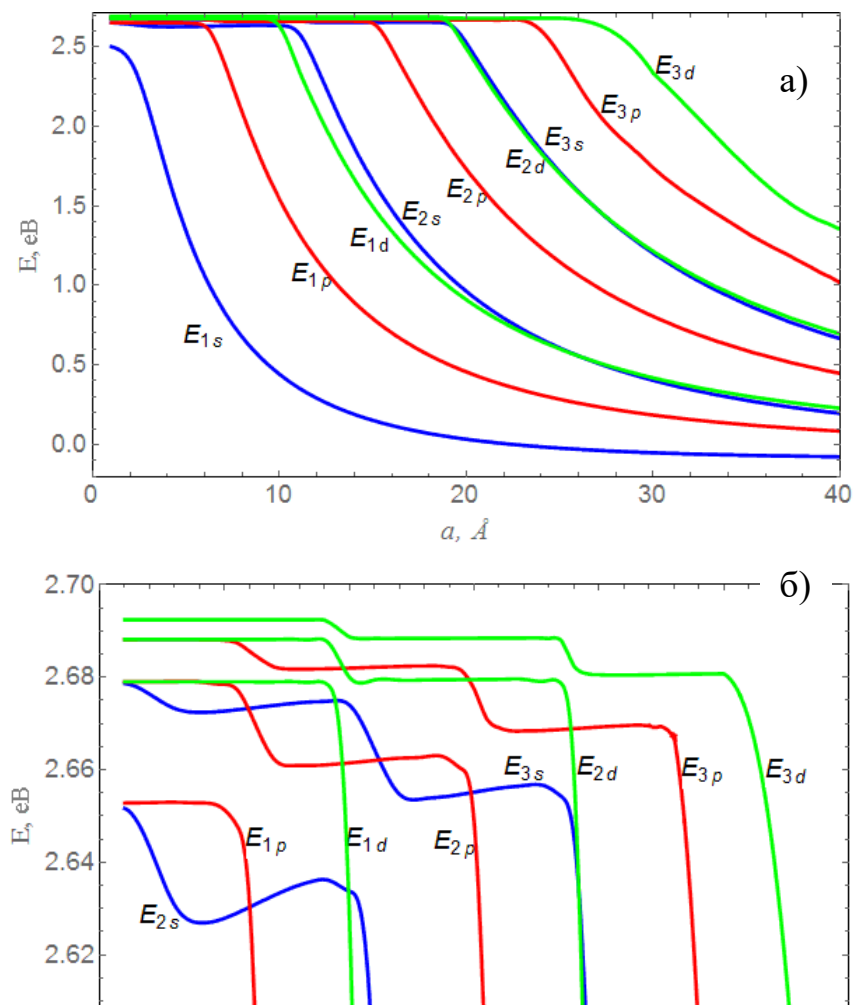


Рисунок 3.3. Енергія допорукового електрона у КТ для основного та декількох збуджених станів

Подальше зменшення радіуса квантової точки  $a$  приводить до того, що в певному діапазоні радіусів квантової точки енергія кожного стану досягає певного значення, яке практично від радіуса не залежить. Залежно від порядку енергетичного рівня таких ділянок є декілька. Наприклад, для енергії 1s, 1p, 1d-станів таких областей є по одній для кожного стану; для енергії 2s-, 2p-, 2d-станів таких областей є по дві для кожного стану; для енергії 3s-, 3p-, 3d-станів таких областей є по три для кожного стану. Таким чином, можна зробити висновок, що кількість зазначених ділянок залежить від номера розв'язку дисперсійного рівняння. У цих діапазонах розмірів квантової точки існують поверхневі стани. Для підтвердження цього висновку на рис.3.4 подано залежність густини ймовірності перебування електрона для фіксованого радіуса квантової точки. Як видно з рис.3а енергетичний рівень перебуває вище потенціального бар'єру, що зумовлений потенціалом обмеження, однак утримується кулонівським потенціалом, тому існує зв'язаний стан. Саме у цій області, як показує графік розподілу густини ймовірності (рис.3а) ймовірність перебування електрона за межами квантової точки є набагато більшою, ніж у квантовій точці. Таким чином, електрон перебуває з великою ймовірністю за межами квантової точки, однак утримується кулонівським полем біля поверхні квантової точки. Такі стани слід називати поверхневими, які зумовлені донорною домішкою.

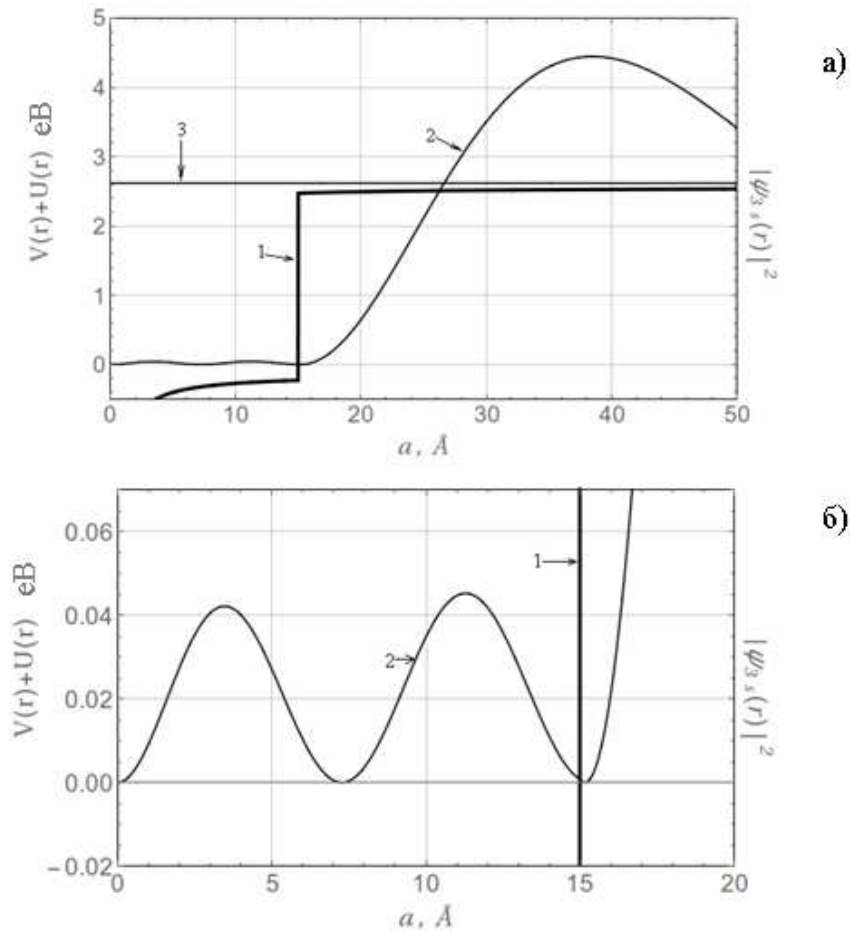


Рисунок 3.4. Розподіл густини ймовірності (крива 2) перебування електрона у КТ для 3s-стану за наявності домішки у центрі КТ. Кривою 1 позначено потенціальну енергію  $V(r)+U(r)$ . Прямая лінія 3 – енергія електрона у 3s-стані. Радіус КТ 15 Å

Крім поверхневих станів, зумовлених домішкою, можуть існувати і стани, що зумовлені поверхневою поляризаційною пасткою. Їх сумарний вплив вивчено у наступному параграфі та роботі [2\*].

### 3.3. Енергетичний спектр електрона у квантовій точці з донорною домішкою та з поляризаційною пасткою на гетеромежі

Розв'язавши систему (3.12), отримуємо енергію та хвильові функції електрона у наногетеросистемі  $CdS/SiO_2$ . Результати обчислень подано на рис.3.5.

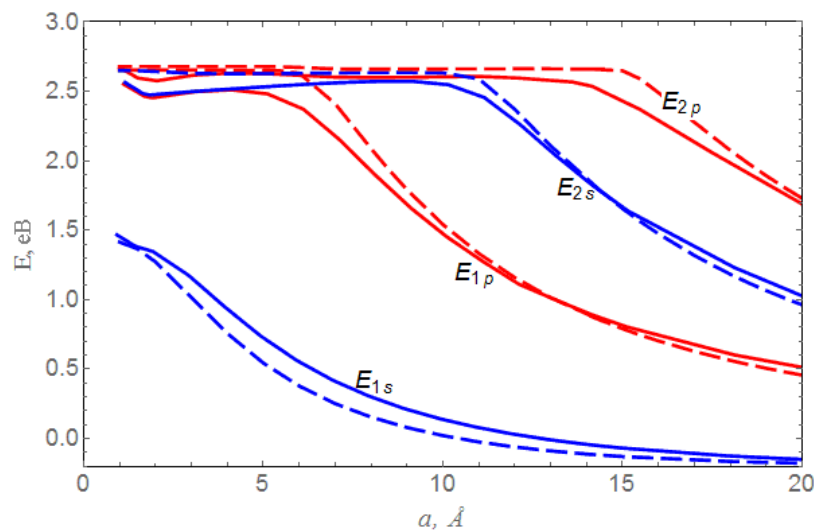


Рисунок 3.5. Енергія домішкового електрона з урахуванням поляризаційних зарядів на гетеромежі  $CdS/SiO_2$  (суцільні криві) і без (штрихові).

Як видно з рисунку, врахування поляризаційних зарядів змінює енергію системи. Для великих радіусів КТ отримано відомий результат [13, 15]: при більшій діелектричній проникності КТ від діелектричної проникності матриці енергія системи збільшується. Однак для малих радіусів КТ, що мало досліджені у зазначених та інших роботах [2\*, 13, 15], врахування поляризаційних зарядів зменшує енергію. Це стає зрозуміло з огляду на потенціал (3.1), що побудовано на рис.3.1 для радіуса КТ 12 Å. Як видно з рис.3.2 за межами КТ виникає потенціальна яма (поляризаційна пастка). Очевидно, що для малих радіусів внаслідок просторового обмеження електрон виштовхується за межі КТ і потрапляє в область поляризаційної пастки. Тому

врахування поляризаційного потенціалу для малих радіусів КТ (коли існують поверхневі стани) зменшує енергію. Таким чином, можна зробити висновок, що поляризаційні заряди та іон домішки є двома незалежними причинами існування поверхневих станів. Як видно з рис.3.5, для надто малих радіусів КТ (менших  $10\text{\AA}$ ) результати представляють суто теоретичний інтерес, однак це не спростовує висновки, що зроблено вище. Існують КТ, для яких зазначені ефекти спостерігаються і при більших радіусах КТ. Це все залежить від ефективного радіуса Бора для масивного кристалу, який для  $CdS$  дорівнює  $14,5\text{\AA}$ .

### 3.4. Коефіцієнт поглинання електромагнітних хвиль квантовою точкою з донорною домішкою і поляризаційною пасткою на гетеромежі квантова точка-матриця

У цьому параграфі обчислено спектральний коефіцієнт поглинання електромагнітних хвиль, яке зумовлене переходами електрона з основного стану з збуджені поверхневі стани. Нехай гетеросистема опромінюється лінійно поляризованим світлом вздовж осі  $z$ . Тоді у дипольному наближенні переходи можливі між станами  $\Delta l = \pm 1$  та  $\Delta m = 0$ . Використовуючи формули з [48-50], запишемо лінійний коефіцієнт поглинання світла:

$$\alpha_{m,n}(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0 \varepsilon}} \frac{N |d_{mn}|^2 \hbar \Gamma}{(E_n - E_m - \hbar \omega)^2 + (\hbar \Gamma)^2}, \quad (3.13)$$

де  $\varepsilon_0$  – електрична стала,  $\mu_0$  – магнітна стала,  $c$  – швидкість світла,  $\hbar \Gamma$  – параметр релаксації, що визначається розсіюванням на фононах,  $d_{mn}$  – матричний елемент дипольного моменту міжрівневих переходів. Якщо  $T \approx 4$  К, то  $\hbar \Gamma$  прямує до нуля:

$$\begin{aligned} \alpha_{m,n}(\omega) &= \lim_{\hbar \Gamma \rightarrow 0} \left( \omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0 \varepsilon}} \frac{N |d_{mn}|^2 \hbar \Gamma}{(E_n - E_m - \hbar \omega)^2 + (\hbar \Gamma)^2} \right) = \\ &= \omega \pi \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0 \varepsilon}} N |d_{mn}|^2 \delta(E_n - E_m - \hbar \omega). \end{aligned} \quad (3.14)$$

$N$  – концентрація КТ. На практиці отримуються набори КТ, що розташовані у матриці. Який би метод вирощування не використовувався, завжди набір КТ можна характеризувати дисперсією за розмірами. Нехай розподіл КТ описується функцією Гауса:

$$g(\tilde{s}, \bar{a}, a) = \frac{1}{\tilde{s} \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(a - \bar{a})^2}{2\tilde{s}^2}\right), \quad (3.15)$$

де  $a$  – радіус КТ (змінна),  $\tilde{s}$  – півширина розподілу (3.15), яку можна виразити через середній радіус  $\bar{a}$  і величину  $\sigma$  яка виражає зміну розмірів КТ у

відсотках:  $\tilde{s} = \bar{a}\sigma / 100$ . З урахуванням дисперсії КТ за розмірами (3.15) коефіцієнт поглинання системи квантових точок записано так:

$$\alpha_{m,n;system}(\omega) = \omega\pi \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0\varepsilon}} N \int g(s, \bar{a}, a) |d_{mn}|^2 \delta(E_n(a) - E_m(a) - \hbar\omega) da. \quad (3.16)$$

Після використання властивостей дельта-функції, отримано:

$$\alpha_{m,n;system}(\omega) = \omega\pi \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0\varepsilon}} N \int g(s, \bar{a}, a) |d_{mn}|^2 \sum_i \frac{\delta(a - a_{0i})}{\left| \frac{d}{da} (E_n(a) - E_m(a) - \hbar\omega) \right|_{a=a_{0i}}} da, \quad (3.17)$$

де  $a_{0i}$  – прості нулі функції

$$F(a) = (E_n(a) - E_m(a) - \hbar\omega).$$

Отже,

$$\alpha_{m,n;system}(\omega) = \omega\pi \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0\varepsilon}} N \sum_i \frac{g(s, \bar{a}, a_{0i}) |d_{mn}(a_{0i})|^2}{\left| \frac{d}{da} (E_n(a) - E_m(a) - \hbar\omega) \right|_{a=a_{0i}}}. \quad (3.18)$$

На рис.3.6 подано коефіцієнт поглинання (3.18), що зумовлений міжрівневими переходами електрона для радіуса КТ 12 Å, що приблизно дорівнює двом сталим ґратки. Дисперсію за розмірами КТ вибрано 5%.

Як видно з рис.3.6 коефіцієнт поглинання, що зумовлений переходом у поверхневий стан (1s-2p) є на 5-6 порядків меншим. Це зумовлено тим, що відстань між відповідними енергетичними рівнями є більшою, а дипольний момент міжрівневих переходів 1s-2p є меншим порівняно з переходом 1s-1p.

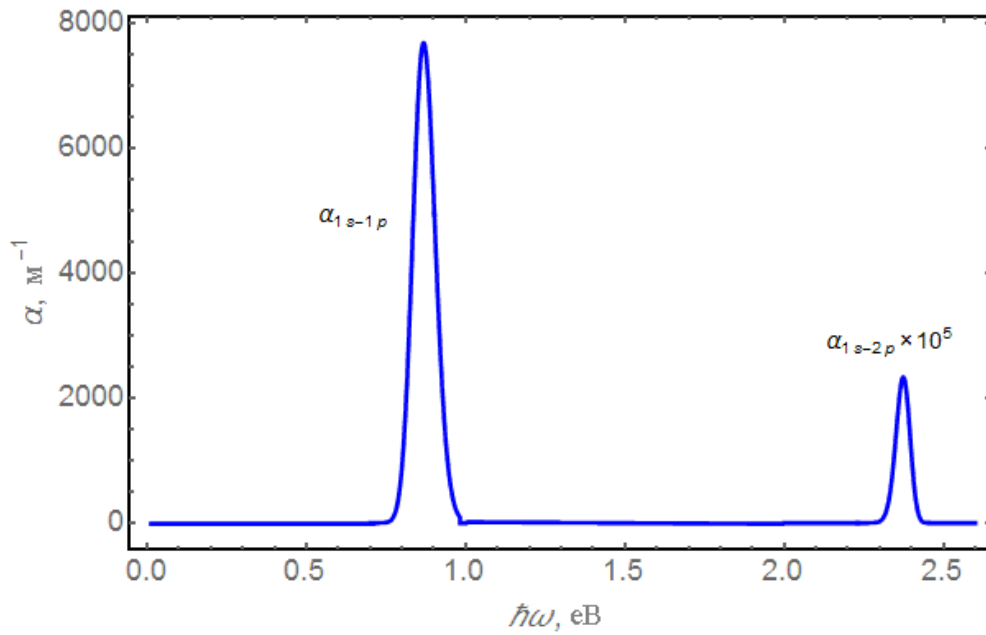


Рисунок 3.6. Коефіцієнт поглинання електромагнітних хвиль, що зумовлене міжрівневими переходами електрона з об'ємного стану  $1s$  в об'ємний стан  $1p$  ( $1s-1p$ ) та в поверхневий  $2p$  ( $1s-2p$ )

Крім того слід зазначити, що перехід з основного у перший збуджений стан ( $1s-1p$ ) за величиною  $\epsilon$  великим і знаходиться по енергетичній шкалі досить далеко від наступного можливого переходу з основного стану у поверхневий збуджений ( $1s-2p$ ). Зважаючи на це, можна стверджувати, що навіть при кімнатній температурі цей пік ( $1s-1p$ ) поглинання має спостерігатися на експерименті.



### Висновки до розділу 3

1. Показано, що якщо різниця діелектричних проникностей між матеріалами КТ і матриці ( $CdS/SiO_2$ ) становить близько 62%, то існують поверхневі стани на гетеромежі  $CdS/SiO_2$  для випадків з домішкою і без неї. Причому у поляризаційну пастку на гетеромежі  $CdS/SiO_2$  попадає електрон, який перебуває як в основному, так і у збудженому станах залежно від розміру КТ.
2. Встановлено, що іон донорної домішки забезпечує існування поверхневих станів на гетеромежі  $CdS/SiO_2$  для розмірів КТ ( $10 \text{ \AA} \leq a \leq 30 \text{ \AA}$ ), коли просторове обмеження виштовхує електрон за межі КТ.
3. Виявлено, що як іон донорної домішки, так і потенціальна пастка на гетеромежі  $CdS/SiO_2$  індукують поверхневі стани квантової точки  $CdS$ .
4. Встановлено, що коефіцієнт поглинання у спектральному діапазоні ( $1,24 \text{ мкм} \leq \lambda \leq 1,55 \text{ мкм}$ ), яке зумовлене електронними переходами між об'ємними станами ( $1s \rightarrow 1p$ ), є на 5 порядків більшим від коефіцієнта поглинання електромагнітних хвиль ( $0,517 \text{ мкм} \leq \lambda \leq 0,539 \text{ мкм}$ ), яке виникає при переходах між об'ємним  $1s$  та поверхневим  $2p$  станами ( $1s \rightarrow 2p$ ).

## РОЗДІЛ 4

### ВПЛИВ МІЛКИХ ДОМІШКОВИХ СТАНІВ ТА ЕКСИТОН- ДОМІШКОВИХ КОМПЛЕКСІВ НА МІЖЗОННЕ ПОГЛИНАННЯ СВІТЛА СИСТЕМОЮ КВАНТОВИХ ТОЧОК

#### 4.1. Модель квантової точки з мілкою домішкою різної природи

Розглядається гетеросистема з сферичною напівпровідниковою квантовою точкою радіусом  $a$ , що поміщена у діелектричну матрицю. Нехай розмір КТ такий, що має місце умова квантування і потенціальна енергія електрона та дірки на відстані параметра ґратки змінюється плавно. Тоді при розв'язанні рівняння Шредінґера для електронів чи дірок можна скористатися методом ефективної маси. Вважаємо, що ефективні маси квазічастинок є ізотропними у кожній складовій гетеросистеми. Відповідно ефективна маса електрона і важкої дірки у КТ –  $m_{e,1}$ ,  $m_{h,1}$ , а у матриці –  $m_{e,2}$ ,  $m_{h,2}$ . Діелектрична проникність КТ і матриці –  $\varepsilon_1$  і  $\varepsilon_2$  відповідно. Вважаємо, що у центрі КТ можуть знаходитися заряджені чи нейтральні домішки донорного чи акцепторного типу. Саме ці домішки можуть спричинити утворення різного роду домішково-екситонних комплексів:

- 1)  $D^+-X$  (позитивно заряджений іон донорної домішки  $D^+$  та екситон  $X$ );
- 2)  $A^-X$  (негативно заряджений іон акцепторної домішки  $A^-$  та екситон  $X$ );
- 3)  $D^0X$  (нейтральна донорна домішка  $D^0$  та екситон  $X$ );
- 4)  $A^0X$  (нейтральна акцепторна домішка  $A^0$  та екситон  $X$ ), які проявляються в оптичних спектрах.

Гамільтоніан електронів (дірок) для комплексів  $D^+-X$  та  $A^-X$ , з використанням атомної системи одиниць, має вигляд:

$$\hat{H}_{\left\{ \begin{smallmatrix} D^+-X \\ A^-X \end{smallmatrix} \right\}} = \hat{H}_{\left\{ \begin{smallmatrix} D \\ A \end{smallmatrix} \right\}} + \hat{H}_{\left\{ \begin{smallmatrix} h \\ e \end{smallmatrix} \right\}} - \frac{1}{\varepsilon |\vec{r}_e - \vec{r}_h|} + \frac{1}{\varepsilon r_{\left\{ \begin{smallmatrix} h \\ e \end{smallmatrix} \right\}}}, \quad (4.1)$$

де

$$\hat{H}_{\left\{ \begin{smallmatrix} D \\ A \end{smallmatrix} \right\}} = -\frac{1}{2} \nabla \frac{1}{m_{\left\{ \begin{smallmatrix} e \\ h \end{smallmatrix} \right\}}} \nabla - \frac{1}{\varepsilon r_{\left\{ \begin{smallmatrix} e \\ h \end{smallmatrix} \right\}}} + U_{\left\{ \begin{smallmatrix} e \\ h \end{smallmatrix} \right\}} \left( \begin{matrix} r_{\left\{ \begin{smallmatrix} e \\ h \end{smallmatrix} \right\}} \\ r_{\left\{ \begin{smallmatrix} e \\ h \end{smallmatrix} \right\}} \end{matrix} \right) \quad (4.2)$$

– гамільтоніан донора (акцептора),

$$U_{\left\{ \begin{smallmatrix} e \\ h \end{smallmatrix} \right\}} \left( \begin{matrix} r_{\left\{ \begin{smallmatrix} e \\ h \end{smallmatrix} \right\}} \\ r_{\left\{ \begin{smallmatrix} e \\ h \end{smallmatrix} \right\}} \end{matrix} \right) = \begin{cases} 0, & r_{\left\{ \begin{smallmatrix} e \\ h \end{smallmatrix} \right\}} \leq a, \\ U_{\left\{ \begin{smallmatrix} e \\ h \end{smallmatrix} \right\},0} & > a \end{cases} \quad (4.3)$$

– потенціальна енергія, що зумовлена розривом зон провідності (валентної) зон,

$$\hat{H}_{\left\{ \begin{smallmatrix} h \\ e \end{smallmatrix} \right\}} = -\frac{1}{2} \nabla \frac{1}{m_{\left\{ \begin{smallmatrix} h \\ e \end{smallmatrix} \right\}}} \nabla + U_{\left\{ \begin{smallmatrix} h \\ e \end{smallmatrix} \right\}} \left( \begin{matrix} r_{\left\{ \begin{smallmatrix} h \\ e \end{smallmatrix} \right\}} \\ r_{\left\{ \begin{smallmatrix} h \\ e \end{smallmatrix} \right\}} \end{matrix} \right) \quad (4.4)$$

– гамільтоніан заряджених квазічастинок гетеросистеми. Рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (4.1) розв'язано варіаційним методом. Варіаційну хвильову функцію, що є розв'язком цього рівняння вибрано у вигляді:

$$\psi_{\left\{ \begin{smallmatrix} D^+-X \\ A^-X \end{smallmatrix} \right\}} \left( \begin{matrix} \vec{r}_{\left\{ \begin{smallmatrix} h \\ e \end{smallmatrix} \right\}} \\ \vec{r}_{\left\{ \begin{smallmatrix} h \\ e \end{smallmatrix} \right\}} \end{matrix} \right) = C_{\left\{ \begin{smallmatrix} D^+-X \\ A^-X \end{smallmatrix} \right\}} \psi_{\left\{ \begin{smallmatrix} D \\ A \end{smallmatrix} \right\}} \left( \begin{matrix} \vec{r}_{\left\{ \begin{smallmatrix} e \\ h \end{smallmatrix} \right\}} \\ \vec{r}_{\left\{ \begin{smallmatrix} e \\ h \end{smallmatrix} \right\}} \end{matrix} \right) \psi_{\left\{ \begin{smallmatrix} h \\ e \end{smallmatrix} \right\}} \left( \begin{matrix} \vec{r}_{\left\{ \begin{smallmatrix} h \\ e \end{smallmatrix} \right\}} \\ \vec{r}_{\left\{ \begin{smallmatrix} h \\ e \end{smallmatrix} \right\}} \end{matrix} \right) \exp \left[ -\alpha_{\left\{ \begin{smallmatrix} D^+-X \\ A^-X \end{smallmatrix} \right\}} \left| \vec{r}_{\left\{ \begin{smallmatrix} h \\ e \end{smallmatrix} \right\}} - \vec{r}_{\left\{ \begin{smallmatrix} h \\ e \end{smallmatrix} \right\}} \right| \right], \quad (4.5)$$

де  $C_{\left\{ \begin{smallmatrix} D^+-X \\ A^-X \end{smallmatrix} \right\}}$  – стала нормування, а функції  $\psi_{\left\{ \begin{smallmatrix} D \\ A \end{smallmatrix} \right\}}, \psi_{\left\{ \begin{smallmatrix} h \\ e \end{smallmatrix} \right\}}$  є точними розв'язками

відповідних рівнянь Шредінгера з домішкою (донорною чи акцепторною) та без них відповідно:

$$\hat{H}_{\left\{ \begin{smallmatrix} D \\ A \end{smallmatrix} \right\}} \psi_{\left\{ \begin{smallmatrix} D \\ A \end{smallmatrix} \right\}} \left( \begin{matrix} \vec{r}_{\left\{ \begin{smallmatrix} e \\ h \end{smallmatrix} \right\}} \\ \vec{r}_{\left\{ \begin{smallmatrix} e \\ h \end{smallmatrix} \right\}} \end{matrix} \right) = E_{\left\{ \begin{smallmatrix} e \\ h \end{smallmatrix} \right\}} \psi_{\left\{ \begin{smallmatrix} D \\ A \end{smallmatrix} \right\}} \left( \begin{matrix} \vec{r}_{\left\{ \begin{smallmatrix} e \\ h \end{smallmatrix} \right\}} \\ \vec{r}_{\left\{ \begin{smallmatrix} e \\ h \end{smallmatrix} \right\}} \end{matrix} \right), \quad (4.6)$$

$$\hat{H}_{\{h\} \{e\}} \Psi_{\{h\} \{e\}} \left( \vec{r}_{\{h\} \{e\}} \right) = E_{\{h\} \{e\}} \Psi_{\{h\} \{e\}} \left( \vec{r}_{\{h\} \{e\}} \right). \quad (4.7)$$

Розв'язки рівняння (4.6) виражаються добутком сферичних функцій на функції Кулона чи Віттекера, як у розділі 3, і у [15-16], а розв'язки рівняння (4.7) – добутком сферичних функцій на функції Бесселя.

Згідно з варіаційним методом Рітца, було отримано функціонал, мінімізація якого дала змогу визначити енергію основного стану кожного екситонно-домішкового комплексу.

Гамільтоніан електрона (дірки) гетеросистеми з домішковими комплексами  $D^0$ -X та  $A^0$ -X можна записати у вигляді:

$$\hat{H}_{\left\{ \begin{smallmatrix} D^0-X \\ A^0-X \end{smallmatrix} \right\}} = \hat{H}_{\left\{ \begin{smallmatrix} D^0 \\ A^0 \end{smallmatrix} \right\},1} + \hat{H}_{\left\{ \begin{smallmatrix} D^0 \\ A^0 \end{smallmatrix} \right\},2} + \hat{H}_{\{h\}} - \frac{1}{\varepsilon \left| r_{\{e\},1}^{\{h\}} - r_{\{e\}}^{\{h\}} \right|} - \frac{1}{\varepsilon \left| r_{\{e\},2}^{\{h\}} - r_{\{e\}}^{\{h\}} \right|} + \frac{1}{\varepsilon r_{\{e\}}^{\{h\}}}, \quad (4.8)$$

де

$$\hat{H}_{\left\{ \begin{smallmatrix} D^0 \\ A^0 \end{smallmatrix} \right\},i} = -\frac{1}{2} \nabla_i \frac{1}{m_{\{e\}}^{\{h\}}} \nabla_i - \frac{1}{\varepsilon r_{\{e\}}^{\{h\},i}} + U_{\{e\}}^{\{h\}} \left( r_{\{e\}}^{\{h\},i} \right), \quad i=1,2, \quad (4.9)$$

$\hat{H}_{\{h\} \{e\}}$  виражається формулою (4.4).

Рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (4.8) також розв'язано варіаційним методом Рітца. Пробну хвильову функцію основного стану вибрано у вигляді:

$$\Psi_{\left\{ \begin{smallmatrix} D^0-X \\ A^0-X \end{smallmatrix} \right\}} \left( \vec{r}_{\{h\}}^{\{e\}}, \vec{r}_{\{e\},1}^{\{h\}}, \vec{r}_{\{e\},2}^{\{h\}} \right) = C_{\left\{ \begin{smallmatrix} D^0-X \\ A^0-X \end{smallmatrix} \right\}} \Psi_{\left\{ \begin{smallmatrix} D^0 \\ A^0 \end{smallmatrix} \right\},1} \left( \vec{r}_{\{h\},1}^{\{e\}} \right) \Psi_{\left\{ \begin{smallmatrix} D^0 \\ A^0 \end{smallmatrix} \right\},2} \left( \vec{r}_{\{h\},2}^{\{e\}} \right) \Psi_{\{h\}} \left( \vec{r}_{\{h\}}^{\{e\}} \right) \times \\ \times \exp \left[ -\alpha_{\left\{ \begin{smallmatrix} D^0-X \\ A^0-X \end{smallmatrix} \right\},1} \left| \vec{r}_{\{h\}}^{\{e\}} - \vec{r}_{\{e\},1}^{\{h\}} \right| - \alpha_{\left\{ \begin{smallmatrix} D^0-X \\ A^0-X \end{smallmatrix} \right\},2} \left| \vec{r}_{\{h\}}^{\{e\}} - \vec{r}_{\{e\},2}^{\{h\}} \right| \right], \quad (4.10)$$

де функції  $\psi_{\left\{ \begin{smallmatrix} D^0 \\ A^0 \end{smallmatrix} \right\},1} \left( \begin{smallmatrix} \vec{r}_e \\ \vec{r}_h \end{smallmatrix} \right)_1$ ,  $\psi_{\left\{ \begin{smallmatrix} D \\ A \end{smallmatrix} \right\},2} \left( \begin{smallmatrix} \vec{r}_e \\ \vec{r}_h \end{smallmatrix} \right)_2$ ,  $\psi_{\left\{ \begin{smallmatrix} h \\ e \end{smallmatrix} \right\}} \left( \begin{smallmatrix} \vec{r}_h \\ \vec{r}_e \end{smallmatrix} \right)$ , є точними розв'язками рівнянь (4.6)-(4.7),  $\alpha_{\left\{ \begin{smallmatrix} D^0-X \\ A^0-X \end{smallmatrix} \right\},1}$ ,  $\alpha_{\left\{ \begin{smallmatrix} D^0-X \\ A^0-X \end{smallmatrix} \right\},2}$  – варіаційні параметри.

Якщо у КТ немає домішок або їх вплив незначний, то в гетеросистемі можуть виникати «чисті» екситонні стани. В цьому випадку гамільтоніан системи має вигляд:

$$\hat{H}_X = \hat{H}_e + \hat{H}_h - \frac{1}{\varepsilon |\vec{r}_e - \vec{r}_h|}, \quad (4.11)$$

де  $\hat{H}_e, \hat{H}_h$  визначається формулою (4.4), а варіаційна функція для основного стану, що застосовується при розв'язанні рівняння Шредінгера методом Рітца, має вигляд:

$$\psi_X(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = C_X \psi_e(\vec{r}_e) \psi_h(\vec{r}_h) \exp[-\alpha_X |\vec{r}_e - \vec{r}_h|], \quad (4.12)$$

$\alpha_X$  – варіаційний параметр,  $\psi_e(\vec{r}_e)$ ,  $\psi_h(\vec{r}_h)$  – точні розв'язки рівнянь (4.7).

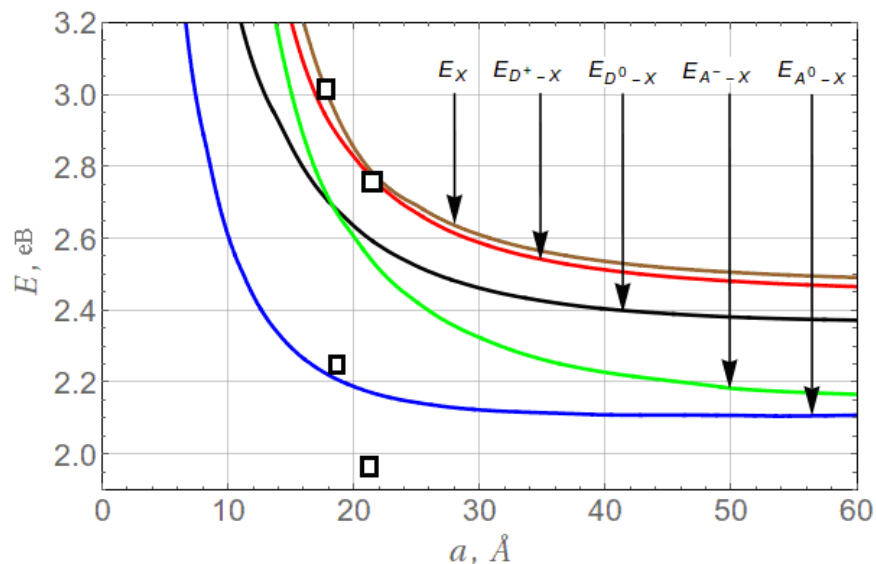
На основі всіх вище поданих формул було визначено енергетичні спектри екситон-домішкових комплексів у КТ. Результати числових обчислень подано у наступному параграфі та приведені у роботах [1\*, 10\*].

## 4.2. Енергія екситона та екситон-домішкових комплексів у квантових точках

Обчислення відповідних енергій проведено для КТ гетеросистеми  $CdS/SiO_2$ , параметри якої подано у таблиці [75]:

Кристал	$m_e$	$m_h$	$\varepsilon$	$U_{0e}$ , eВ	$U_{0h}$ , eВ
$CdS$	0,2	0,74	5,5	2.70	3.42
$SiO_2$	1,0	1,00	3,9	---	---

На рис.4.1 подано результати числових обчислень енергій основних станів екситона та зазначених екситонно-домішкових комплексів для різних радіусів КТ. Видно, що енергія екситона Ваньє-Мотта мало відрізняється від енергії екситон-домішкового комплексу  $D^+-X$  для усього вказаного діапазону розмірів КТ.



**Рисунок 4.1.** Енергія екситона та екситонно-домішкових комплексів у КТ. Квадратиками позначено експериментально визначені [43, 67] енергії квантових переходів у КТ  $CdS$  з середніми радіусами КТ  $17$  Å та  $21,5$  Å

З графіків видно, що наявність домішок призводить до пониження енергії електрон-діркової пари порівняно з випадком їх відсутності. Це означає, за наявності таких домішок системі енергетично вигідніше утворити екситон-домішкові комплекси. На можливе існування таких комплексів у КТ *CdS* вказано в експериментальних у роботах [43, 67].

Для зіставлення результатів теорії з даними експерименту на рис.4.1 зазначено також експериментально визначені в роботах [43, 67] енергії квантових переходів при люмінесценції КТ *CdS*. З проведених обчислень та аналізу експериментальних даних можна зробити висновок, що енергії  $E_1=3.05$  еВ та  $E_2=2.75$  еВ можна трактувати як електрон-дірковий перехід при їх рекомбінації за наявності зарядженого донора або при його відсутності. Енергію переходу  $E_3=2.25$  еВ можна пов'язати з наявністю в КТ нейтрального акцептора, що утворює з екситоном комплекс  $A^0-X$ .

Щоб визначити внесок кожного з домішкових комплексів на оптичні параметри, було також обчислено спектральний коефіцієнт поглинання гетеросистеми за наявності у КТ різного роду екситонно-домішкових комплексів.

### 4.3. Поглинання світла екситон-домішковими комплексами

Розглядається випадок, що гетеросистема опромінюється монохроматичним лінійно поляризованим світлом частотою  $\omega = 2\pi c / \lambda$  слабкою інтенсивністю (недостатньою для проявлення нелінійних ефектів). Відповідно коефіцієнт поглинання світла наногетеросистемою з КТ, що зумовлене міжзонними прямими переходами, при низьких температурах визначається за формулою [68]:

$$\alpha_{QD}(\lambda) = \frac{A}{\hbar \frac{2\pi c}{\lambda}} \sum_{i,j} |\langle \psi_i | \psi_j \rangle|^2 \delta\left(E_j - E_i - \frac{2\pi c \hbar}{\lambda}\right), \quad (4.13)$$

де  $A = \frac{\pi \hbar e^2}{m_0^2 \varepsilon_0 c n} N P_0^2$ ,  $e$  – заряд електрона,  $m_0$  – маса вільного електрона,  $\varepsilon_0$  – електрична константа,  $c$  – швидкість світла,  $N$  – концентрація квантових точок,  $n = \sqrt{\varepsilon}$  – показник заломлення,  $\hbar\omega$  – енергія падаючого кванта,  $P = \sqrt{2m_0 E_p}$ ,  $E_p \approx 23$  еВ – матричний елемент Кейна [68],  $\psi_i, \psi_j$  – огибаючі хвильові функції початкового ( $i$ -го) та кінцевого ( $j$ -го) станів. Надалі розглядаємо дворівневу систему  $E_1$  – енергія системи за умови, що електрон знаходиться у валентній зоні, а  $E_2 = E_1 + \hbar\omega$ .

Врахуємо неоднорідне розширення смуг поглинання, що пов'язане з дисперсією розмірів КТ в матриці. В роботі [69] показано, що врахування такої дисперсії спричинює кінцеву півширину смуги поглинання. Нехай розподіл за розмірами КТ описується функцією Гауса

$$g(\tilde{s}, \bar{a}, a) = \frac{1}{\tilde{s}\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(a - \bar{a})^2}{2\tilde{s}^2}\right), \quad (4.14)$$

де  $a$  – радіус КТ (змінна),  $\tilde{s}$  – півширина розподілу (4.14), яка визначається через середній радіус  $\bar{a}$  і величину  $\sigma$ , виражену у відсотках:  $\tilde{s} = \bar{a}\sigma / 100$ .



Враховуючи усі описані вище наближення, коефіцієнт поглинання гетеросистеми з КТ запишеться:

$$\alpha(\lambda) = B\lambda \int g(s, \bar{a}, a) I_{2,1}(a) \delta\left(E_2(a) - E_1(a) - \frac{2\pi c\hbar}{\lambda}\right) da, \quad (4.15)$$

де

$$I_{2,1}(a) = |\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle|^2 \quad (4.16)$$

– інтеграл перекриття,  $B = \frac{A}{2\pi c\hbar}$ . З урахуванням властивості дельта-функції,

отримано:

$$\alpha(\lambda) = B\lambda \int g(s, \bar{a}, a) I_{2,1}(a) \sum_n \frac{\delta(a - a_{0,n})}{\left| \frac{d}{da} \left( E_2(a) - E_1(a) - \frac{2\pi c\hbar}{\lambda} \right) \right|_{a=a_{0,n}}} da, \quad (4.17)$$

де  $a_{0n}$  – прості нулі функції  $F(a) = \left( E_2(a) - E_1(a) - \frac{2\pi c\hbar}{\lambda} \right)$ . Звідси,

$$\alpha(\lambda) = B\lambda \sum_n \frac{g(s, \bar{a}, a_{0,n}) I_{2,1}(a_{0,n})}{\left| \frac{d}{da} \left( E_2(a) - E_1(a) - \frac{2\pi c\hbar}{\lambda} \right) \right|_{a=a_{0,n}}}. \quad (4.18)$$

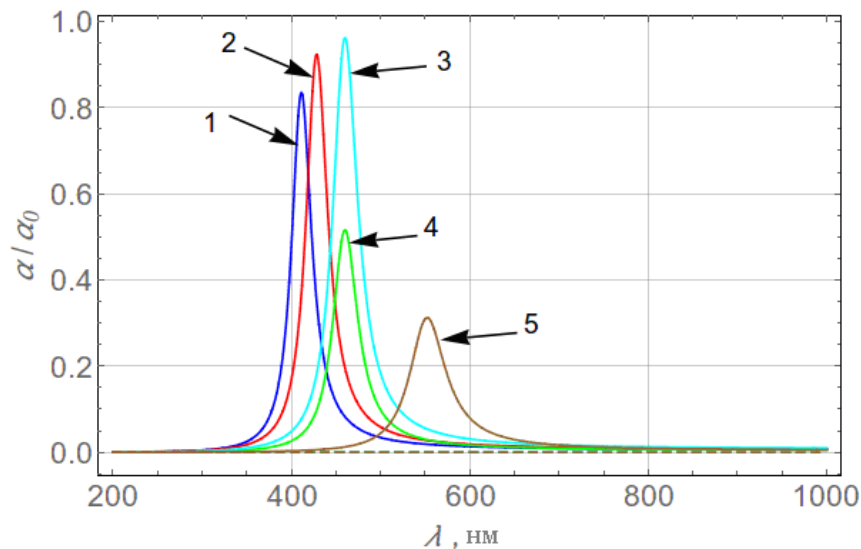
Деталізуємо функції  $\psi_1, \psi_2$ . Якщо у КТ відсутня домішка і при поглинанні електромагнітної хвилі утворюється екситон, то  $\psi_1 = \delta(\vec{r}_e - \vec{r}_h)$ ,  $\psi_2 = \psi_X(\vec{r}_e, \vec{r}_h)$ . Коли у КТ є іон донорної чи акцепторної домішки і при поглинанні світла утворюється комплекс  $D^+X$  або  $A^-X$ , тоді  $\psi_1 = \delta(\vec{r}_e - \vec{r}_h)$ ,  $\psi_2 = \psi_{\begin{cases} D^+X \\ A^-X \end{cases}}(\vec{r}_e, \vec{r}_h)$ .

Нехай у КТ є нейтральна донорна (акцепторна) домішка і при поглинанні утворюється комплекс  $D^0-X$  ( $A^0-X$ ). Тоді

$$\psi_1 = \psi_{\{A\},1}^{\{D\}} \left( \vec{r}_{\{e\},1}, \vec{r}_{\{h\},1} \right) \delta \left( \vec{r}_{\{h\}} - \vec{r}_{\{e\},2} \right), \quad \psi_2 = \psi_{\{A-X\}}^{\{D-X\}} \left( \vec{r}_{\{e\}}, \vec{r}_{\{h\},1}, \vec{r}_{\{e\},2}, \vec{r}_{\{h\},2} \right).$$

Для усіх зазначених моделей КТ з різними видами домішок були визначені інтеграли перекриття  $|\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2$  та визначено коефіцієнти поглинання згідно з формулою (4.18).

На рис.4.2 показано графіки залежності відносного коефіцієнта поглинання від довжини хвилі для гетеросистеми  $CdS/SiO_2$ .

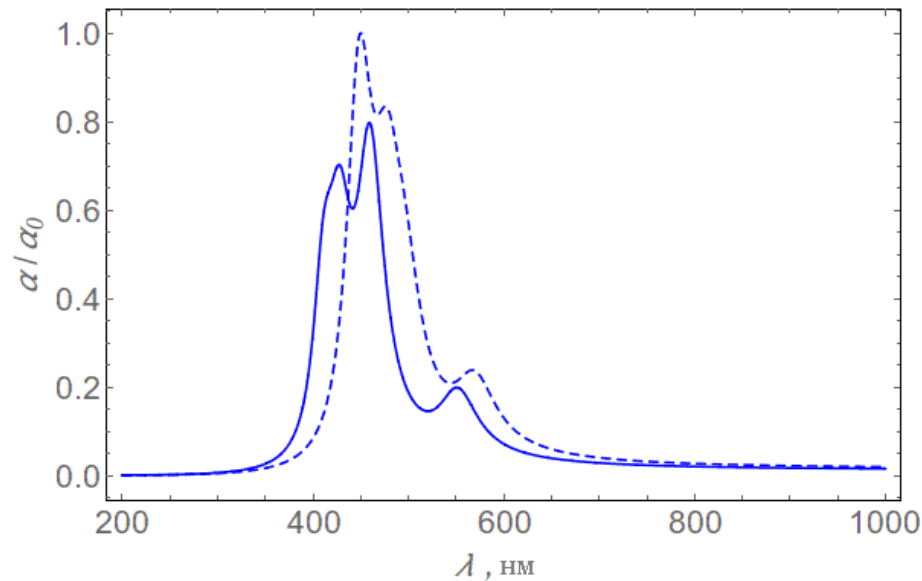


**Рисунок 4.2.** Залежність відносного коефіцієнта поглинання для кожного окремого типу екситонного комплексу від довжини хвилі. Крива 1 відповідає екситонному поглинанню  $X$ , 2 –  $D^+-X$ , 3 –  $A^-X$ , 4 –  $D^0-X$ , 5 –  $A^0-X$ . Середній радіус КТ –  $17 \text{ \AA}$ ,  $\sigma=10\%$

Як видно з рис.4.2 кожен описаний вище механізм поглинання світла відповідає за різні значення висот піків поглинання і розташування їх по шкалі довжин хвиль. Для середнього радіуса КТ  $17 \text{ \AA}$  наявність домішок призводить до зсуву усіх піків поглинання у бік довгих хвиль відносно екситонної смуги (крива 1). Піки поглинання, які зумовлені наявністю нейтральних домішок  $D^0$  чи  $A^0$ , є

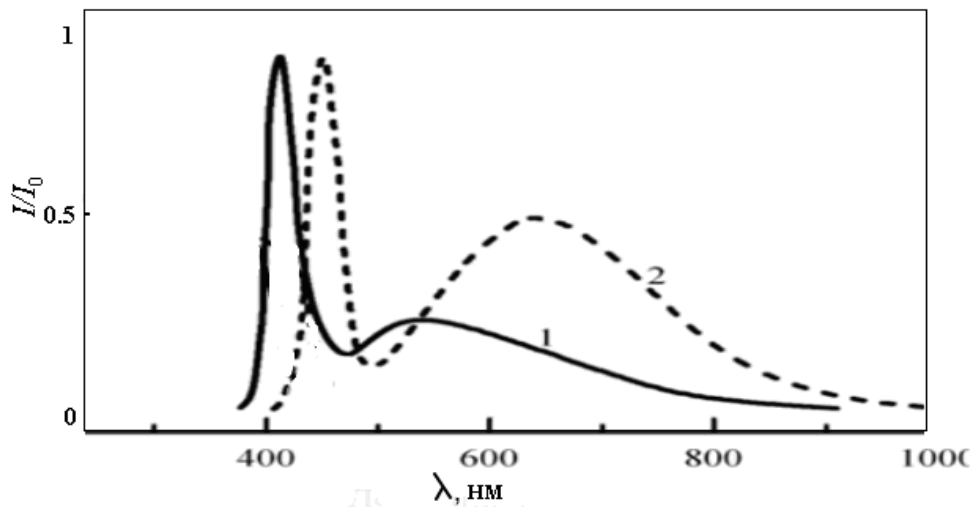
приблизно у два рази меншими за піки поглинання, які відповідають за наявність іонів домішок  $D^+$  чи  $A^-$ .

Якщо врахувати, що у гетеросистемі з КТ відбуваються усі зазначені механізми поглинання, то сумарний коефіцієнт поглинання матиме вигляд (рис.4.3). Отриманий графік порівняємо з відповідним графіком люмінесценції експериментальних робіт [43, 67] (рис.4.4).

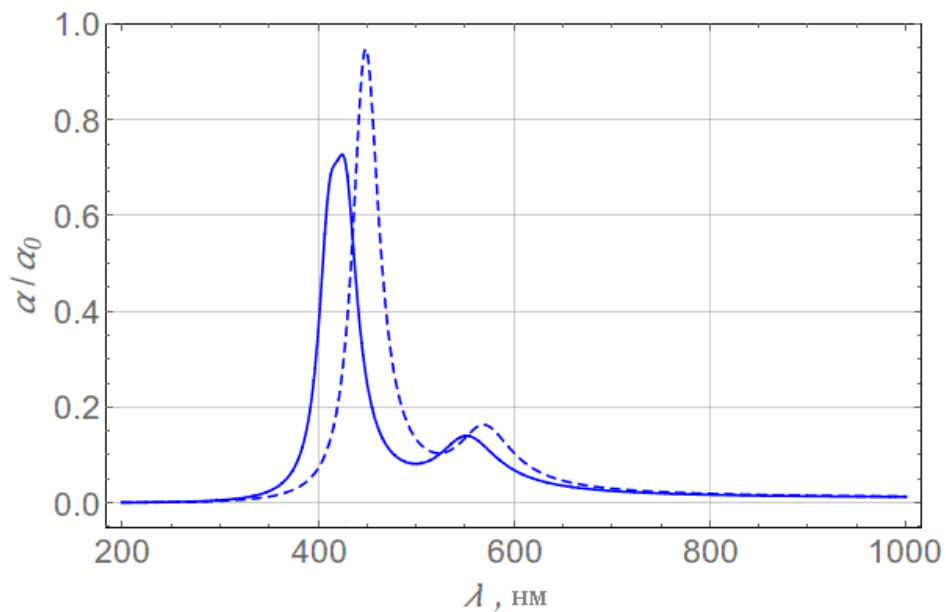


**Рисунок 4.3.** Залежність відносного коефіцієнта поглинання з урахуванням усіх описаних у роботі механізмів поглинання. Суцільна крива – середній радіус КТ дорівнює  $17 \text{ \AA}$ , штрихова –  $21,5 \text{ \AA}$ ,  $\sigma=10\%$

Якщо порівняти обчислені значення (рис.4.3) і експериментальні (рис.4.4), то видно, що на експерименті спостерігалися очевидно не усі зазначені нами типи домішково-екситонних комплексів. У зв'язку з цим ми вважаємо, що у експериментальних роботах у гетеросистемі могли бути КТ з домішками акцепторного типу, що взаємодіють з екситонами і бездомішкові КТ, де спостерігаються екситонні переходи. Для порівняння даних з експериментом, ми обчислили коефіцієнт поглинання для випадку екситона  $X$  і екситона, що взаємодіє з нейтральним акцептором  $A^0-X$ . Результати подано на рис.4.5.



*Рисунок 4.4. Експериментальна залежність відносної інтенсивності люмінесценції для КТ CdS. Суцільна крива – середній радіус КТ дорівнює 17 Å, штрихова – 21,5 Å [43, 67]*



*Рисунок 4.5. Відносний коефіцієнт поглинання світла для КТ з середнім радіусом 17 Å (суцільна) та 21,5 Å (штрихова);  $\sigma=10\%$ .*

Порівняльний аналіз експериментальних графіків (рис. 4.4) і розрахованих (рис.4.5) показує якісне узгодження для енергій та півширин для

довгохвильових смуг та кількісне узгодження цих величин для екситонних смуг. Головні максимуми на експериментальних кривих пояснюються рекомбінацією екситонів, а у широкі смуги дає внесок рекомбінація за участю нейтрального акцептора. Слід зазначити, що при люмінесценції спостерігається зсув Стокса [69-71]. Експериментально максимуми люмінесценції спостерігалися при 435 нм (середній радіус 17 Å) та 480 нм (середній радіус 21,5 Å). Максимуми головного екситонного поглинання, отриманого теоретично, у нашій роботі для аналогічних середніх розмірів КТ відповідають 420 нм і 450 нм. Тобто експериментальні піки люмінесценції зсунуті у довгохвильову область порівняно з нашими результатами поглинання на  $\Delta\lambda = 15$  нм і 30 нм відповідно. Отримані різниці енергій узгоджуються з експериментальними даними про зсув Стокса у КТ *CdS* [69-72].

Щодо кількісного співпадіння теорії та експерименту в області 550-650 нм та їх розбіжності можна пояснити тим, що в теорії не враховано поверхневі дефектні стани, які могли також давати внесок у широку смугу люмінесценції. Разом з цим можливо існують ще інші причини, що призводять до отримання широких смуг випромінювання світла.

### Висновки до розділу 4

1. Встановлено, що енергія екситона ( $E_X$ ) є більшою від енергії екситон-домішкового комплексу ( $E_{D^+-X}$ ) у КТ  $CdS/SiO_2$  для середнього розміру  $a=17 \text{ \AA}$  на 10 меВ, тоді як для середнього розміру  $21.5 \text{ \AA}$  на 9 меВ. Енергія екситона у КТ з комплексом  $D^0-X$  ( $E_{D^0-X}$ ) є меншою на 11 меВ від енергії екситона у КТ з комплексом  $A^-X$  ( $E_{A^-X}$ ) для середнього розміру  $a=17 \text{ \AA}$ , тоді як для розміру квантової точки  $21.5 \text{ \AA}$  різниця екситонних енергій становить  $E_{D^0-X} - E_{A^-X} = 10 \text{ меВ}$ . А енергія утворення екситон-домішкового комплексу  $A^0-X$  – найменша для всіх розглянутих розмірів КТ, що зумовлена диполь-дипольною взаємодією між  $A^0-X$ .
2. Розраховано сумарний спектральний коефіцієнт поглинання світла у квантових точках  $CdS/SiO_2$  розмірами  $17 \text{ \AA}$  та  $21,5 \text{ \AA}$ , зумовлене екситонами (X) та екситон-домішковими комплексами ( $D^+-X$ ,  $D^0-X$ ,  $A^-X$ ,  $A^0-X$ ), основна смуга поглинання якого характеризується двома максимумами («горбками»), які припадають на довжини хвиль  $420 \text{ нм}$  і  $450 \text{ нм}$  відповідно. Це пояснюється квантовими переходами електрона з утворенням екситонів (X) та екситонних комплексів ( $D^+-X$ ,  $D^0-X$ ,  $A^-X$ ).
3. Показано, що головний максимум смуги коефіцієнта поглинання квантовою точкою  $CdS/SiO_2$  розміром  $a=17 \text{ \AA}$  спостерігається на довжині хвилі  $420 \text{ нм}$ , який є близьким до максимуму експериментальної інтенсивності люмінесценції.
4. Встановлено, що максимуми довгохвильового крила смуги поглинання квантовою точкою  $CdS/SiO_2$  розмірами  $17 \text{ \AA}$  та  $21,5 \text{ \AA}$ , зумовлені наявністю екситон-домішкового комплексу  $A^0-X$ , припадають на довжини хвиль  $550 \text{ нм}$  та  $570 \text{ нм}$ .

## РОЗДІЛ 5

### ПОВЕРХНЕВІ СТАНИ КВАНТОВИХ ТОЧОК

#### 5.1. Модель поверхневих станів у межах поляризаційної пастки

Розглянуто наногетеросистему, яка складається з матриці  $SiO_2$ , що є діелектриком, у яку поміщено сферичну КТ, радіусом  $a$ . Ефективна маса електрона у кожному середовищі ( $m_1^*, m_2^*$ ) відповідно. Також кожне середовище характеризується своєю діелектричною проникністю ( $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ ).

Біля гетеромежі існує перехідний шар, де діелектрична проникність змінюється від значення  $\varepsilon_1$  в КТ до  $\varepsilon_2$  у матриці. Тоді енергія взаємодії заряду з поляризаційними зарядами на межі поділу середовищ (потенціал самодії) [13], можна отримати у вигляді:

$$V_p(r) = \frac{\gamma}{4\varepsilon(r)} \int_0^\infty dr_0 \frac{\operatorname{th}\left(\frac{r_0 - a}{L}\right) + \frac{r_0}{L} \operatorname{sech}\left(\frac{r_0 - a}{L}\right)}{r_0^2 - r^2}, \quad (5.1)$$

$$\varepsilon(r) = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} \left[ 1 - \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \operatorname{th}\left(\frac{r - a}{L}\right) \right], \quad (5.2)$$

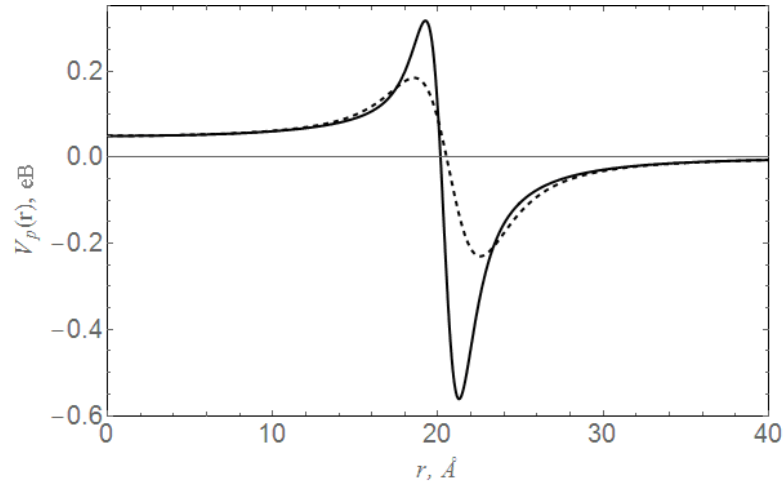
Ці формули та усі наступні у параграфі записуються з використанням атомної системи одиниць ( $m_0 = 1, \hbar = 1, e = 1$ ). Проведений аналіз на основі (5.1) (рис.5.1) показав, що розмір перехідного шару буде величиною порядку сталої ґратки  $a_0$ , за умови  $L < a_0$ .

Потенціал обмеження для електрона у гетеросистемі описується:

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a, \\ U_0, & r > a. \end{cases} \quad (5.3)$$

Використовуючи метод ефективної маси, оператор Гамільтона для електрона гетеросистеми запишемо у вигляді:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \nabla \frac{1}{m(r)} \nabla + U(r) + V_p(r). \quad (5.4)$$



**Рисунок.3.1.** Потенціальна енергія електрона (5.1) у гетеросистемі з КТ CdSe/SiO<sub>2</sub>. Суцільна крива –  $L=a_0/4$ , штрихова крива –  $L=a_0/2$ . Радіус КТ –  $20 \text{ \AA}$

Із вигляду потенціальної енергії  $V_p(r)$  (рис.5.1.) видно, що у приповерхневій області у матриці існує потенціальна яма – поляризаційна пастка, у якій квазічастинка може локалізуватися. Глибина потенціальної ями  $\min(V_p(r))$  є більшою для меншого значення параметра  $L$ . Подальша мета – знаходження умов існування цих станів (умов локалізації електронних станів у поляризаційній пастці).

Враховуючи сферичну симетрію задачі, розв'язок рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (5.4) подано у вигляді добутку радіальної та кутової частин:

$$\psi(\vec{r}) = R(r)Y(\theta, \phi) = \frac{\chi(r)}{r} Y(\theta, \phi), \quad (5.5)$$

де  $Y(\theta, \phi)$  – сферичні функції. Після підстановки (5.5) у рівняння Шредінгера отримано два рівняння у КТ та матриці:

$$\chi_i''(r) + 2m_i^* \left( -U(r) - V_p(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} + E \right) \chi_i(r) = 0, \quad i = 1, 2, \quad (5.6)$$



де  $l$  – орбітальне квантове число. Для знаходження розв’язку рівнянь (5.6) в обох областях використано два чисельні методи: метод стрільби та фазовий метод [74], які адаптовано для випадку стрибкоподібної ефективної маси з метою забезпечення неперервності хвильової функції та потоку густини ймовірності на гетеромежах. Результати цього підходу представлені у роботах [4\*-6\*] і викладені у наступному параграфі.

## 5.2. Застосування методу стрільби та фазового методу для розрахунку енергетичного спектру

Спочатку розглянуто метод стрільби. Для першої області (область КТ) рівняння (5.6) чисельно розв'язано від центру КТ  $r=0$  до її межі  $r=a$ , причому крайові умови у точці  $r=0$  такі:

$$\chi_1(0, l, E) = 0, \quad \left. \frac{d}{dr} \chi_1(r, l, E) \right|_{r=0} = 1. \quad (5.7)$$

Перша умова забезпечує фізичні умови поведінки розв'язку у нулі, а друга умова з (5.7) еквівалентна вибору сталого коефіцієнта у розв'язках. Отже, якщо розв'язати рівняння (5.6) у КТ, то можна отримати розв'язок

$$\chi_1 = C_1 \chi_1(r, l, E) \quad \text{або} \quad R_1 = C_1 R_1(r, l, E), \quad (5.8)$$

де  $E$  та  $l$  будуть входити у розв'язок як параметри, а значення  $C_1$  буде залежати від вибору другої умови (5.7).

Щоб розв'язати рівняння у іншій області (матриці), слід шукати розв'язок від точки  $r=A_0$  до межі КТ  $r=a$  (справа на ліво), де  $A_0$  – фізично велика відстань. Вибрано такі крайові умови у точці  $r=A_0$ :

$$\chi_2(A_0, l, E) = 0, \quad \left. \frac{d}{dr} \chi_2(r, l, E) \right|_{r=A_0} = -1. \quad (5.9)$$

Фізичний та математичний зміст умов є аналогічним до умов (5.7). Таким чином отримано розв'язки

$$\chi_2 = C_2 \chi_2(r, l, E, A_0) \quad \text{або} \quad R_2 = C_2 R_2(r, l, E, A_0). \quad (5.10)$$

Накладаючи умови неперервності радіальної складової хвильової функції та радіальної складової потоку густини ймовірності, отримано лінійну однорідну систему рівнянь відносно  $C_1, C_2$ , яка є сумісною, якщо її визначник дорівнює нулю:

$$F(a, l, E, A_0) = \left| \begin{array}{cc} R_1(a, l, E) & -R_2(a, l, E, A_0) \\ \frac{1}{m_1^*} \frac{d}{dr} R_1(r, l, E) \Big|_{r=a} & -\frac{1}{m_2^*} \frac{d}{dr} R_2(r, l, E, A_0) \Big|_{r=a} \end{array} \right| = 0. \quad (5.11)$$

Практично пошук розв'язку реалізовано за таким алгоритмом:

- а) вибирається  $l$  (тип стану s, p, d, ...);
- б) вибирається число  $A_0$ ;
- в) вибирається значення  $E$ , що лежить в діапазоні  $(0; U_0)$ ;
- г) обчислюється усі  $R_i$  (наприклад, у Wolfram Mathematica стандартним солвером NDSolve), потім  $F(a, l, E, A_0)$ .

Повторюючи в), г), отримаємо залежність  $F(a, l, E, A_0)$  від енергії. Відповідно нулі функції і будуть розв'язками рівняння Шредінгера. Далі, збільшуючи  $A_0$ , повторюємо в), г), знаходимо нулі  $F(a, l, E, A_0)$ , змінюючи енергію. Добиваємося потрібної точності. Маючи енергію системи, чисельно знаходимо усі невідомі коефіцієнти і хвильові функції.

Описаний метод має недолік, який стосується вибору значення  $\frac{d}{dr} \chi_i(r, l, E)$  на межах визначення координати. Оскільки похідна у точці описує тангенс кута нахилу дотичної до осі, то у точці 0 і  $A_0$  знак похідної визначатиме куди ввверх чи вниз йде зростання хвильової функції при зміні  $r$ . Це може відобразитися на точності результатів при малих  $A_0$ . Саме тому у роботі застосовано ще і фазовий чисельний метод, що використовується для таких задач.

У методі використано те, що залежність розв'язку якісно відома. Він має осцилюючий характер, причому амплітуда може сильно залежати від координати. Відповідно до методу [74], введено амплітуду  $\rho$  і фазу  $\varphi$  за допомогою співвідношення

$$\chi_i(r) = \rho_i(r) \sin[\varphi_i(r)]. \quad (5.12)$$

Ця умова неоднозначно визначає фазу і амплітуду, тому ще потрібно, щоб  $\rho$  і  $\varphi$  підкорялися ще одній умові:

$$\chi'_i(r) = \rho_i(r) \cos[\varphi_i(r)]. \quad (5.13)$$

Диференціюючи (5.12) і (5.13) по  $r$  і порівнюючи їх між собою, отримаємо два співвідношення:

$$\chi''_i(r) = \rho'_i(r) \cos[\varphi_i(r)] - \varphi'_i(r) \rho_i(r) \sin[\varphi_i(r)], \quad (5.14)$$

$$\rho'_i(r) \sin[\varphi_i(r)] = (1 - \varphi'_i(r)) \rho_i(r) \cos[\varphi_i(r)]. \quad (5.15)$$

З (5.12)–(5.15) виключаються  $\chi_i(r)$  і  $\chi''_i(r)$ . Після нескладних перетворень рівняння (5.6) розщепиться на два рівняння – для фази і амплітуди:

$$\rho'_i(r) = -\rho_i(r) [q_i(r) + \lambda_i - 1] \sin[\varphi_i(r)] \cos[\varphi_i(r)], \quad (5.16)$$

$$\varphi'_i(r) = \cos^2[\varphi_i(r)] + [\lambda_i + q_i(r)] \sin^2[\varphi_i(r)], \quad (5.17)$$

де

$$\lambda_i = 2m_i^* E, \quad q_i(r) = 2m_i^* \left( -U(r) - V_p(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right).$$

Граничні умови в області  $0 \leq r \leq A_0$  приписуються фазі у вигляді:

$$\varphi_1(0) = 0, \quad \varphi_2(A_0) = \pi \cdot j, \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (5.18)$$

Далі необхідно чисельно розв'язати диференціальне рівняння першого порядку (5.17) в двох областях. В першій області рівняння слід розв'язати зліва на право з умовою  $\varphi_1(0) = 0$ . Отримано

$$\varphi_1 = \varphi_1(r, l, E). \quad (5.19)$$

У другій області рівняння потрібно розв'язати справа на ліво з використанням іншої умови  $\varphi_2(A_0) = \pi \cdot j$ . Можна отримати

$$\varphi_2 = \varphi_2(r, l, E, j, A_0). \quad (5.20)$$

Амплітуду треба визначити з рівняння (5.16), шляхом розділення змінних (за умови відомої фази). Розв'язок рівняння для амплітуди має вигляд експоненти з невідомою сталою інтегрування у кожній області  $D_i$ .

З граничних умов для  $R(r)$

$$R_1(a) = R_2(a),$$

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

отримаємо умови для фази і амплітуди. Неперервність хвильової функції задається співвідношенням:

$$D_1 \rho_1(a) \sin[\varphi_1(a)] = D_2 \rho_2(a) \sin[\varphi_2(a)]. \quad (5.21)$$

Для знаходження другої граничної умови обчислено

$$R_i'(r) = \frac{r \chi_i'(r) - \chi_i(r)}{r^2} = \frac{r \rho_i(r) \cos[\varphi_i(r)] - \rho_i(r) \sin[\varphi_i(r)]}{r^2} =$$

$$= \frac{\rho_i(r)}{r^2} \{ r \cos[\varphi_i(r)] - \sin[\varphi_i(r)] \}.$$

Відповідно

$$D_1 \frac{\rho_1(a)}{m_1^*} \{ a \cos[\varphi_1(a)] - \sin[\varphi_1(a)] \} = D_2 \frac{\rho_2(a)}{m_2^*} \{ a \cos[\varphi_2(a)] - \sin[\varphi_2(a)] \}. \quad (5.22)$$

З умови нетривіального розв'язку системи (5.21)–(5.22) отримується функція  $G(a, l, E, j, A_0)$  і рівняння, що аналогічне до (5.11):

$$G(a, l, E, j, A_0) = 0. \quad (5.23)$$

Перевага методу полягає у наступному: чисельно розв'язується рівняння першого порядку і немає проблем з визначенням тангенса кута нахилу дотичної.

Практично пошук розв'язку реалізовано так:

- а) вибирається  $l$  (тип стану s, p, d, ...);
- б) вибирається число  $A_0$ ;
- в) вибирається значення  $E$ , що лежить в діапазоні  $(0; U_0)$ ;
- г) обчислюється усі  $\varphi_i$  (наприклад, у Wolfram Mathematica стандартним солвером NDSolve), потім  $\rho_i$  і в підсумку  $G(a, l, E, j, A_0)$ .

Повторюючи в), г), отримаємо залежність  $G(a, l, E, j, A_0)$  від енергії. Відповідно нулі функції і будуть розв'язками рівняння Шредінгера. Далі, збільшуючи,  $A_0$ , повторюємо в), г), знаходимо нулі  $G(a, l, E, j, A_0)$ , змінюючи енергію. Добиваємося потрібної точності. Маючи енергію системи, чисельно знаходимо усі невідомі коефіцієнти і хвильові функції.

Якщо ж знехтувати поляризаційними зарядами (потенціалом самодії у (5.4)), то рівняння Шредінгера має точний розв'язок.

Результати застосування обох чисельних методів та точні розв'язки (без урахування  $V_p(r)$ ) подано у наступному параграфі.

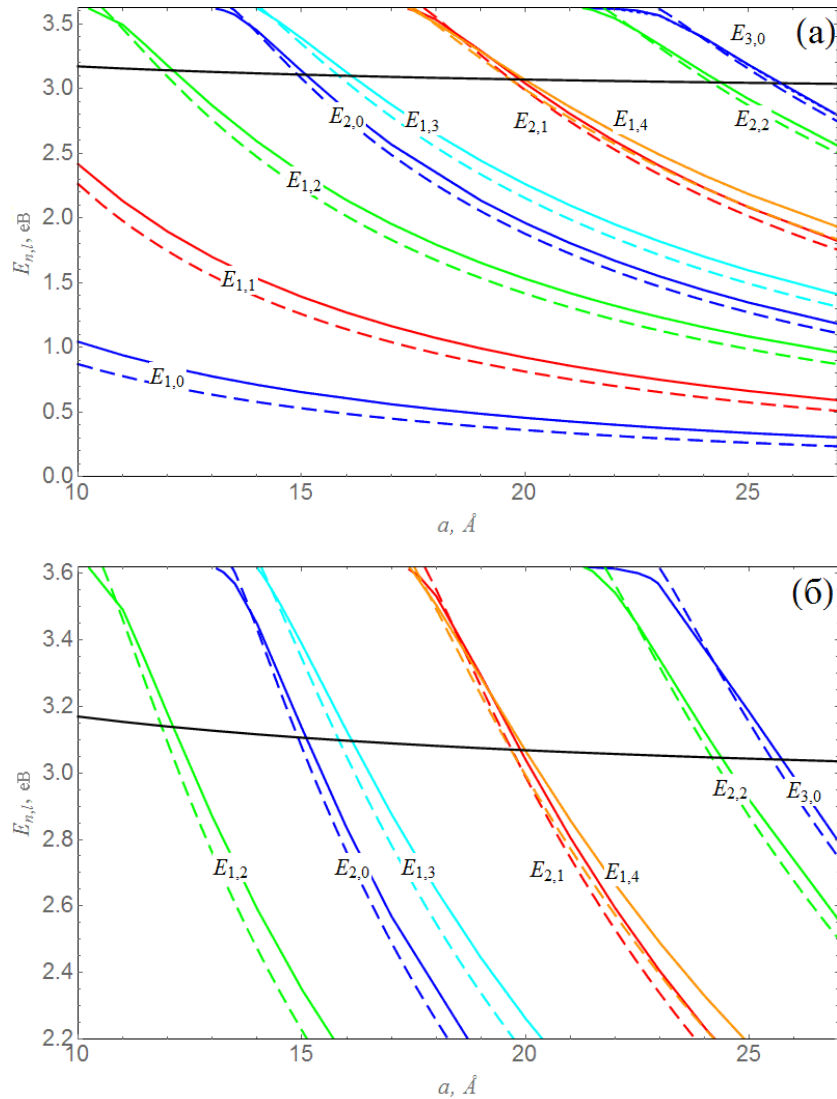
### 5.3. Енергія поверхневих станів та розподіл густини ймовірності електрона в околі гетеромежі $CdSe/SiO_2$ та $CdTe/SiO_2$

Для розрахунку енергії електрона у наногетеросистемах  $CdSe/SiO_2$ ,  $CdTe/SiO_2$  з КТ використовувалися фазовий та метод стрільби. У таблиці 5.1 приведені параметри [75]. монокристалів, що формують наногетеросистеми  $CdSe/SiO_2$ ,  $CdTe/SiO_2$ .

Таблиця 5.1

	$m^* / m_0$	$\varepsilon$	$U_0$ , eV
$CdSe$	0.130	9.29	3.630
$CdTe$	0.095	10.40	3.765
$SiO_2$	1.000	2.10	---

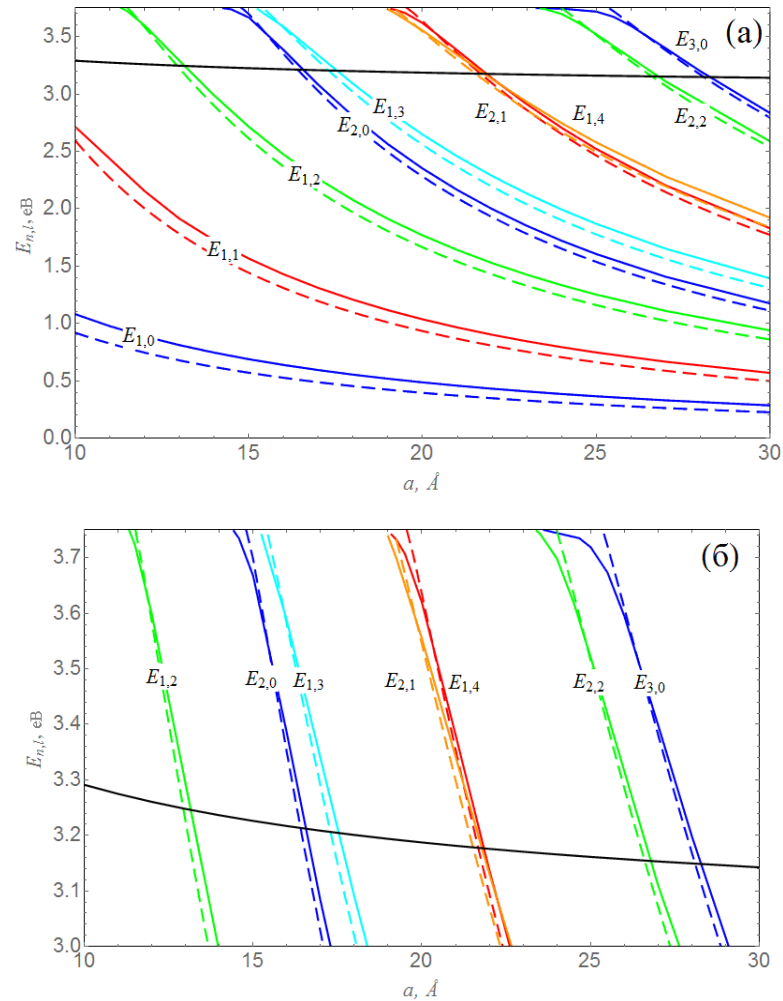
Якщо не враховувати поляризаційний потенціал  $V_p(r)$  (5.1), тоді енергію електрона гетеросистеми можна визначити на основі точних розв'язків рівняння Шредінгера та чисельними методами. Параметр  $A_0$  (5.9), (5.20) підбирався таким чином, щоб чисельні розв'язки та точні розв'язки були однаковими. Знаючи параметр  $A_0$ , можна визначити енергію електрона у гетеросистемі з КТ з урахуванням потенціалу самодії. Числові розрахунки енергії  $E_{n,l}$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots, l = 0, 1, 2, \dots$  проведено фазовим методом з врахуванням (5.1) (суцільні криві) і без його врахування (штрихові криві) (рис.5.2–5.3). Чорною лінією, яка перетинає усі криві енергії, позначено дно поляризаційної ями  $\min(V_p(r))$  як функцію радіуса  $a$  КТ. Таким чином усі значення енергії, які лежать вище дна поляризаційного потенціалу, можуть утворювати поверхневі стани на межі КТ-матриця. Ця умова є необхідною, але недостатньою.



**Рисунок 5.2.** Енергетичний спектр електрона у КТ геретосистеми CdSe/SiO<sub>2</sub>. Штрихові криві – без урахування поляризаційних зарядів, суцільні – з врахуванням. Рисунок а) у масштабі по осі ординат (0;U<sub>0</sub>), рисунок б) у масштабі по осі ординат (2.2;U<sub>0</sub>). Чорна монотонна спадна лінія показує залежність енергії дна поляризаційної ями від радіуса КТ

З рис. 5.2 і 5.3 видно, що із збільшенням радіуса КТ енергія електрона у КТ монотонно зменшується для усіх станів.





**Рисунок 5.3.** *Енергетичний спектр електрона у КТ геретосистеми CdTe/SiO<sub>2</sub>. Штрихові криві – без урахування поляризаційних зарядів, суцільні – з врахуванням. Рисунок а) у масштабі по осі ординат (0;U<sub>0</sub>), рисунок б) у масштабі по осі ординат (3;U<sub>0</sub>). Чорна монотонна спадна лінія показує залежність енергії дна поляризаційної ями від радіуса КТ*

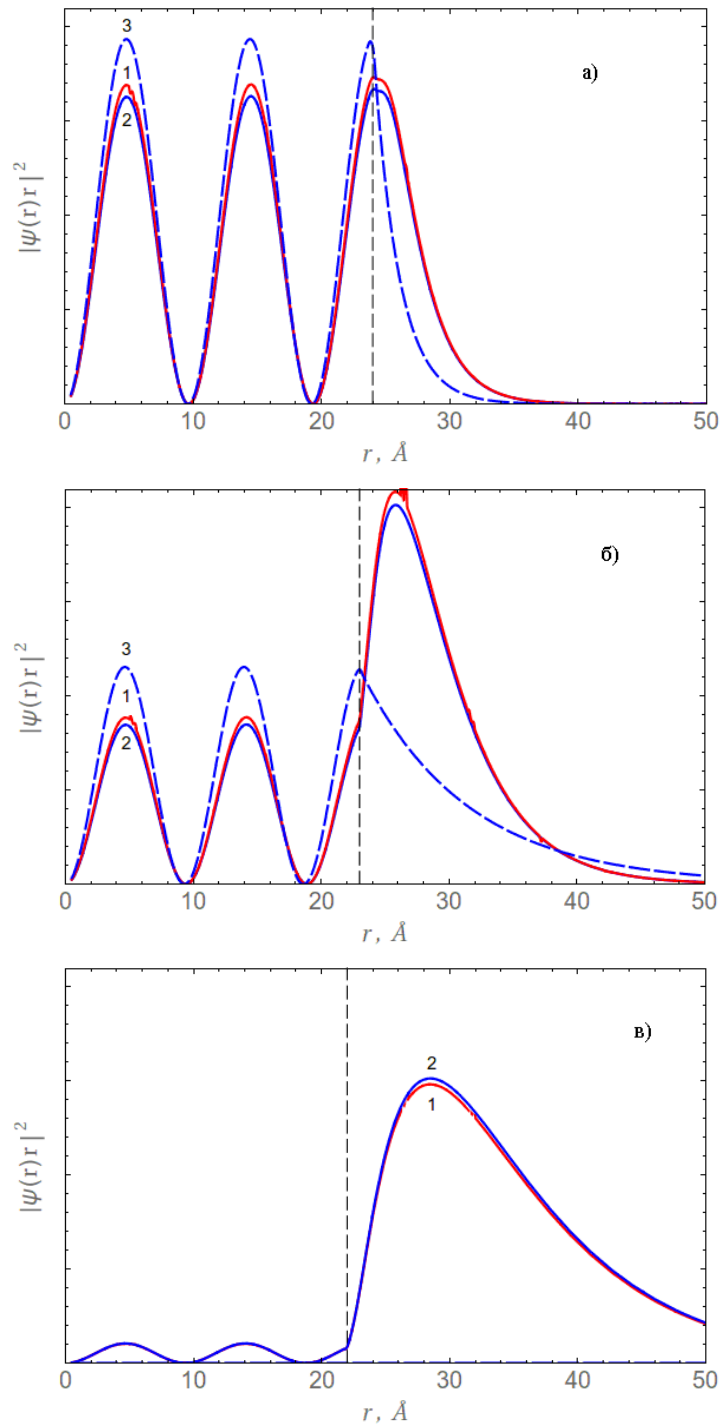
Аналіз залежностей енергії електрона від розмірів КТ показує (рис. 5.2-5.3), що існують два діапазони розмірів КТ: перший – коли енергія електрона з урахуванням потенціалу самодії, є більшою від відповідної енергії без його врахування і друга – навпаки. Причому в першому діапазоні зміни розміру КТ урахування потенціалу самодії зумовлює збільшення енергії квазічастинки

(суцільні криві лежать вище за штрихові). У другому діапазоні розмірів КТ для рівнів  $E_{1,2}, E_{2,0}, E_{1,3}, E_{2,1}, E_{1,4}, E_{2,2}, E_{3,0}$  існують такі розміри  $a$  КТ, що потенціал  $V_p(r)$  зменшує енергію електрона порівняно з випадком  $V_p(r) = 0$ . Співвідношення між енергіями електрона у КТ з урахуванням  $V_p(r)$  і без нього, вказує на те, що електрон є зв'язаним з поверхневою поляризаційною ямою на межі КТ-матриця. Зокрема, для гетеросистеми  $CdSe/SiO_2$  з КТ  $CdSe$  розмірами  $a \in [10; 11] \text{Å}$  стан з енергією  $E_{1,2}$  стає поверхневим, а для  $a \in [22; 23.5] \text{Å}$  поверхневим станом стає  $3s$ . Для  $CdTe/SiO_2$  з КТ  $CdTe$  розмірами  $a \in [12; 13] \text{Å}$  стан з  $E_{1,2}$  є поверхневим, а для розмірів  $a \in [25.5; 27] \text{Å}$  поверхневим є  $3s$ -стан. Для обох гетеросистем існують діапазони розмірів КТ, коли поверхневими є інші стани з енергіями  $E_{2,0}, E_{1,3}, E_{2,1}, E_{1,4}, E_{2,2}$ .

Підтвердження цього висновку впливає з аналізу густини ймовірності знаходження електрона у  $3s$ -стані на гетеромежі КТ-матриця (рис.5.4, 5.5). З графіків видно, що два числових розрахунки енергії електрона і густини ймовірності знаходження електрона на межі КТ-матриця дають близькі результати (рис.5.4, 5.5 криві 1 і 2). На рис.5.4(а-б) і рис.5.5(а-б) штриховим лініям (лінія 3) відповідає густина ймовірності для електрона у випадку  $V_p(r) = 0$ . З рис.5.2, 5.3 видно, що для КТ радіусами  $a = 23 \text{Å}$  та  $a = 22 \text{Å}$  у гетеросистемі  $CdSe/SiO_2$  і  $a = 26 \text{Å}$  та  $a = 25.5 \text{Å}$  у гетеросистемі  $CdTe/SiO_2$  енергія  $3s$ -стану електрона в моделі  $V_p \neq 0$  є меншою від випадку  $V_p = 0$ . Таким чином, потенціал самодії приводить до локалізації електрона на гетеромежі КТ-матриця при відповідних розмірах КТ.

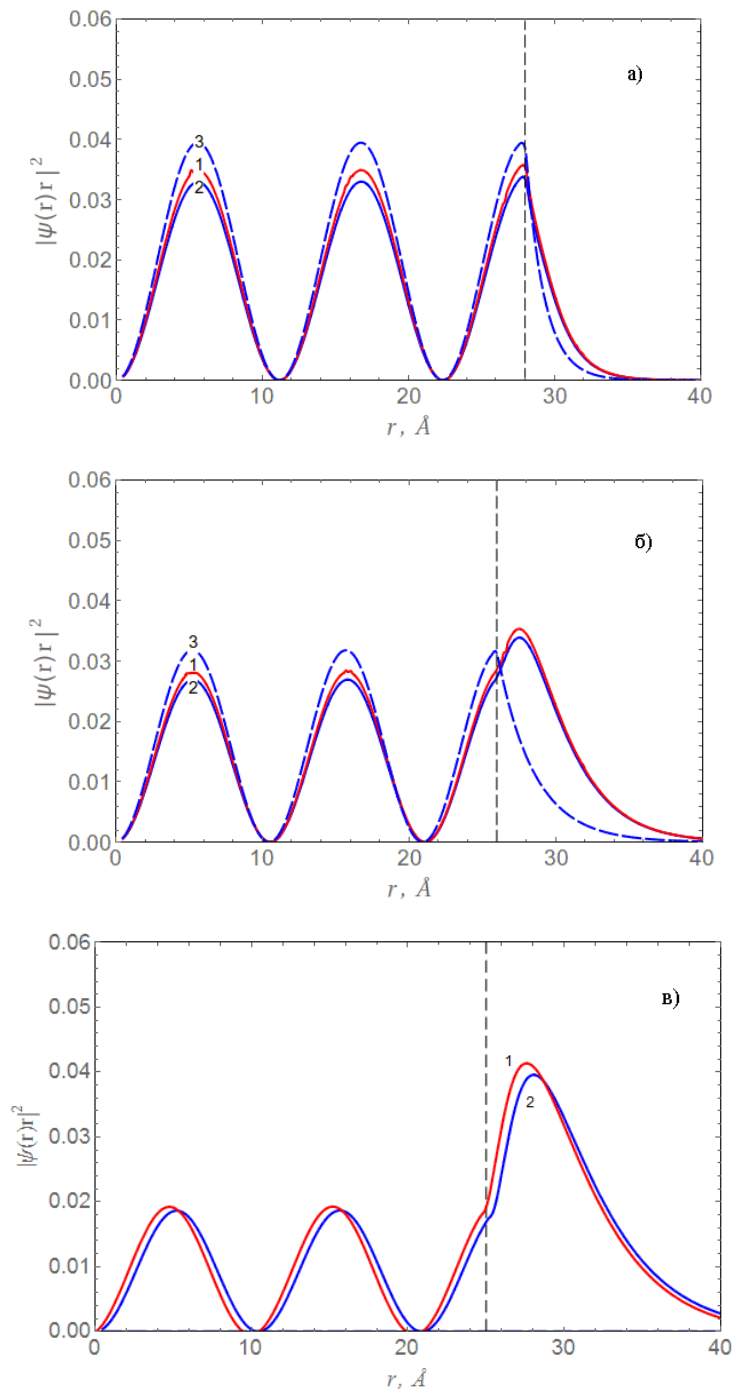
Отже, енергетичний спектр електрона у КТ зазначених гетеросистемах є трьох типів: неперервним, коли енергія електрона більша за висоту бар'єру

$E > U_0$  на межі КТ-матриця; дискретним на гетеромежі КТ-матриця,



**Рисунок 5.4.** Густина ймовірності для електрона в околі гетероїнтерфейсу CdSe/SiO<sub>2</sub>. Крива 1 – метод стрільби, крива 2 – фазовий метод, штрихова крива 3 – без урахування поляризаційних зарядів. Рисунок а) – розмір КТ  $a=24 \text{ \AA}$ , б) – розмір КТ  $a=23 \text{ \AA}$ , в) – розмір КТ  $a=22 \text{ \AA}$

коли енергія електрона  $E \leq U_0$ ; дискретним в об'ємі КТ  $E < U_0$ .



**Рисунок 5.5.** Густина ймовірності для електрона в околі гетероїмежі CdTe/SiO<sub>2</sub>. Крива 1 – метод стрільби, крива 2 – фазовий метод, штрихова крива 3 – без урахування поляризаційних зарядів. Рисунок а) – розмір КТ  $a=28 \text{ \AA}$ , б) – розмір КТ  $a=26 \text{ \AA}$ , в) – розмір КТ  $a=25.5 \text{ \AA}$

Енергія кожного поверхневого рівня електрона є меншою за енергію електрона відповідного стану в моделі, коли потенціал самодії не враховано. Поверхневі зв'язані заряди збільшують енергію кожного енергетичного рівня електрона в об'ємі КТ.

Зі збільшенням радіуса КТ в гетеросистемі кожен дискретний енергетичний рівень, який відщеплюється від неперервного спектру в підбар'єрній області, є поверхневим електронним рівнем в поляризаційній ямі на гетеромежі КТ-матриця. Зі збільшенням розміру КТ від 10 Å до 30 Å в обох гетеросистемах дискретними рівнями, що формуються у поляризаційній ямі є  $E_{1,2}, E_{2,0}, E_{1,3}, E_{2,1}, E_{1,4}, E_{2,2}, E_{3,0}$ . Існують визначені області зміни радіусів, коли ці стани є поверхневими. Кожен діапазон розмірів КТ, коли конкретний стан є поверхневим, є малим, однак розміри цього діапазону зростають зі збільшенням радіуса КТ. При зростанні радіуса КТ дискретний енергетичний рівень у поляризаційній ямі зникає.

#### 5.4. Таммівські рівні електрона у напруженій квантовій точці

Для ілюстрації виникнення таммівських рівнів електрона у напружених КТ *InAs* радіусом  $a \geq 5a_0$  ( $a_0$  – стала ґратки матеріалу КТ) розглядаємо механічно напружену наногетеросистему *InAs/GaAs*, оскільки невідповідність параметрів ґраток матеріалів КТ і матриці становить порядку 7%. Взаємодію однієї КТ з усіма іншими КТ враховуємо у деформаційному наближенні середнього поля [76-78]. Потенціал ненапруженого конфайнменту для електрона у КТ вибираємо у вигляді сферично-симетричної прямокутної потенціальної ями

$$U_{conf}(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a, \\ U_{conf} & r > a. \end{cases} \quad (5.24)$$

У результаті деформації, яка виникає за рахунок невідповідності параметрів ґраток матеріалів КТ і матриці, змінюється глибина конфайнменту на величину

$$U_d(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a, \\ -|D^{(1)}\epsilon^{(1)}| - |D^{(2)}\epsilon^{(2)}| & r > a, \end{cases} \quad (5.25)$$

де  $\epsilon^{(i)} = \text{Sp}\epsilon^{(i)}$ ;  $D^{(i)}$  – сталі гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності матеріалів КТ та матриці,  $i = \begin{cases} 1 \equiv \text{InAs} \\ 2 \equiv \text{GaAs} \end{cases}$ .

З урахуванням виразу (5.25) формула для повної потенціальної енергії електрона матиме вигляд:

$$U(r) = U_{conf}(r) + U_d(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a, \\ U_{conf} - (|D^{(1)}\epsilon^{(1)}| + |D^{(2)}\epsilon^{(2)}|) & r > a, \end{cases} = \begin{cases} 0, & r \leq a, \\ U_0 & r > a, \end{cases} \quad (5.26)$$

де  $\epsilon^{(i)}$  – параметр деформації матеріалів КТ ( $i=1$ ) та матриці ( $i=2$ ) відповідно. Для розрахунку  $\epsilon^{(i)}$ , використали відповідні граничні умови [76-78].

Гамільтоніан електрона з урахуванням повної потенціальної енергії (5.26) записуємо у вигляді:

$$\hat{H}_e = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m_e} \nabla + U(r), \quad (5.27)$$

де

$$m_e = \begin{cases} m_e^{(1)}, & r \leq a, \\ m_e^{(2)}, & r > a \end{cases}$$

– ефективна маса електрона у кристалічній ґратці КТ та матриці.

Для випадку, коли енергія електрона менша за висоту бар'єра ( $E < U_0$ ) розв'язки рівняння Шредінгера з потенціалом (5.26) знаходяться у вигляді добутку сферичної функції Бесселя першого роду і модифікованої функції Бесселя 2 роду на сферичну функцію:

$$\begin{aligned} \psi_e(r, \theta, \varphi) &= \chi_e(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi), \\ \chi_e(r) &= \begin{cases} A_e^{(1)} j(kr), & r \leq a, \\ A_e^{(2)} k(\eta r), & r > a, \end{cases} \end{aligned} \quad (5.28)$$

де  $k = \sqrt{2m_e^{(1)}E / \hbar^2}$ ,  $\eta = \sqrt{2m_e^{(2)}(U_0 - E) / \hbar^2}$ . Дисперсійне рівняння для визначення енергії електрона у наногетеросистемі отримано з межових умов Бен-Денієла-Дюка

$$\begin{cases} A_e^{(1)} j(ka) - A_e^{(2)} k(\eta a) = 0, \\ A_e^{(1)} \frac{1}{m_e^{(1)}} j'(ka) - A_e^{(2)} \frac{1}{m_e^{(2)}} k'(\eta a) = 0. \end{cases}$$

З врахуванням межових умов та умови нормування хвильової функції знаходимо сталі інтегрування  $A_e^{(1)}$ ,  $A_e^{(2)}$ . Енергію основного  $E_{1s}$  і першого збудженого  $E_{1p}$  станів з урахуванням електрон-деформаційної взаємодії та без неї розраховано з розв'язку дисперсійного рівняння. Значення параметрів напівпровідникових матеріалів КТ і матриці та інші константи використані з



роботи [78]. Числові розрахунки енергій  $E_{1s}$  і  $E_{1p}$  електрона у напруженій КТ залежно від її розміру представлені на рис.5.6.

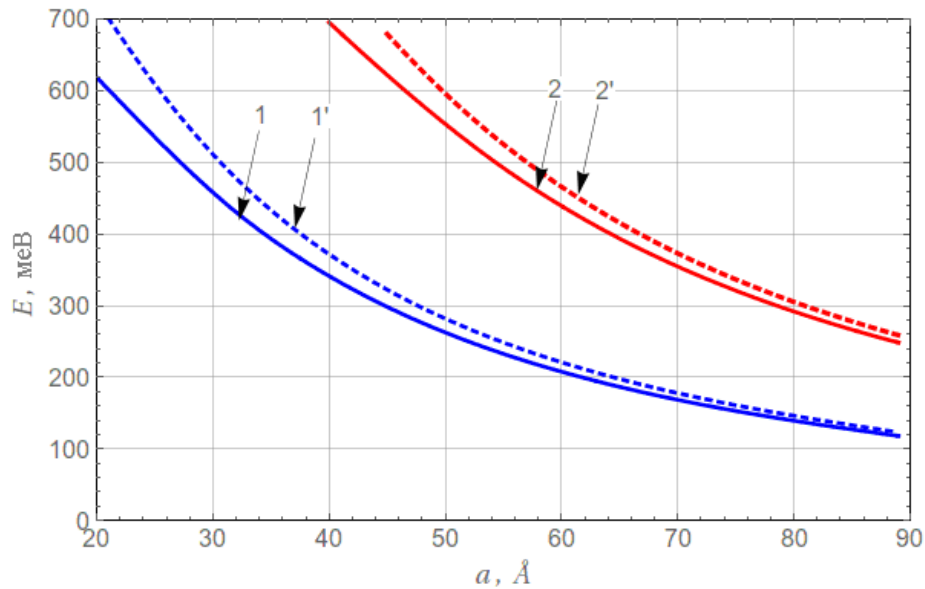


Рисунок 5.6. Зміна енергії 1s-стану (лінії 1,1') та 1p-стану (лінії 2, 2') електрона з урахуванням взаємодії деформації ґратки та електронної підсистеми (лінії 1, 2) та без неї (лінії 1', 2') в залежності від розміру КТ

Як видно з рисунку 5.6, взаємодія деформації ґратки та електронної підсистеми у КТ приводить до зменшення енергії основного та збудженого станів завдяки зменшенню глибини потенціальної ями. Тому і енергія переходу між цими станами буде меншою (рис.5.7), ніж у випадку нехтування електрон-деформаційної взаємодії. Отримані результати в подальшому будуть використані при розрахунку таммівських станів на гетеромежі КТ-матриця.

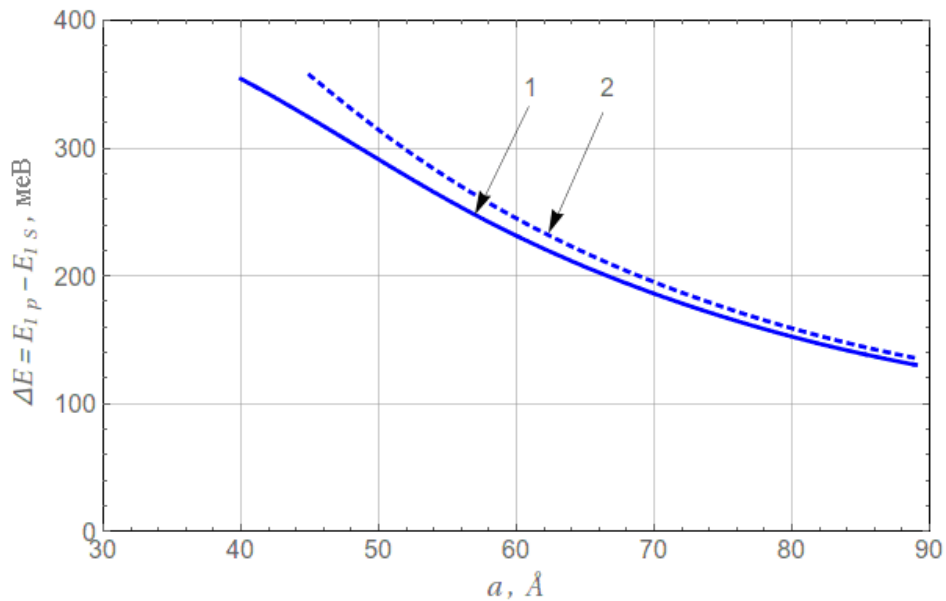


Рисунок 5.7. Енергії переходу з урахуванням взаємодії деформації ґратки та електронної підсистеми (лінія 1) і без неї (лінія 2) як функції радіуса КТ

Квантову точку моделюємо як монокристал розміром ( $a \geq 5a_0$ ), атоми якого розміщені на відстані  $a_0$  один від одного. В об'ємі поблизу кожного атома існує потенціальний бар'єр для електрона висотою  $U_1$  і шириною  $b$  (рис. 5.8). На гетеромежі КТ-матриця існує бар'єр висотою  $U_0$  (рис. 5.8).

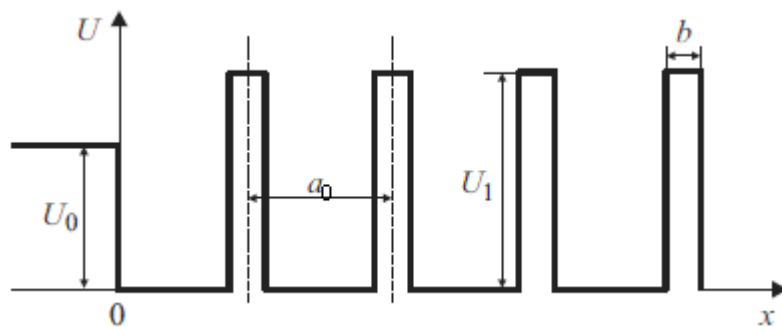


Рисунок 5.8 Потенціальний профіль напруженої наногетеросистеми з КТ в рамках моделі Тамма-Кроніґа-Пені

Представлений потенціальний профіль на гетеромежі КТ-матриця називаємо моделлю Тамма-Кроніґа-Пені. Згідно з класичною моделлю Тамма [79], для

напівскінченних напівпровідників дисперсійне рівняння для визначення енергії поверхневих станів електрона описується співвідношенням:

$$\xi \operatorname{ctg} \xi = \frac{q^2}{2p^2} - q \sqrt{1 - \frac{\xi^2}{q^2}}, \quad (5.29)$$

де  $\xi = a_0 \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} E}$ ,  $q = a_0 \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} U_0}$ ,  $p = a_0 b \frac{m_0 U_1}{\hbar^2}$ ,  $m_0$  – маса вільного електрона.

У межах моделі Кроніга-Пені система рівнянь для визначення дозволених значень енергій (у позначеннях [80]) має вигляд:

$$\begin{cases} \left| \cos \left( ka_0 - \operatorname{arctg} \left( \frac{\Omega a_0}{ka_0} \right) \right) \right| \leq \frac{1}{\sqrt{1 + \left( \frac{\Omega a_0}{ka_0} \right)^2}}, \\ E = \frac{\hbar^2}{2m_0 a_0^2} (ka_0)^2, \end{cases} \quad (5.30)$$

де  $\Omega a_0$  – безрозмірна проникність бар'єрів. Для малих значень енергій  $\frac{\Omega a_0}{ka_0} \ll 1$  вираз (5.30) зведеться до системи рівнянь:

$$\begin{cases} |\sin(ka_0)| \leq \left( \frac{ka_0}{\Omega a_0} \right), \\ E = \frac{\hbar^2}{2m_0 a_0^2} (ka_0)^2. \end{cases} \quad (5.31)$$

В подальшому вважаємо, що енергія мала і розкладемо функцію  $\sin(ka_0)$  в ряд Тейлора, обмежуючись першими двома доданками

$$\begin{cases} \left| ka_0 - \frac{(ka_0)^3}{6} \right| \leq \left( \frac{ka_0}{\Omega a_0} \right), \\ E = \frac{\hbar^2}{2m_0 a_0^2} (ka_0)^2. \end{cases} \quad (5.32)$$

З першого рівняння системи (5.32) знаходимо два розв'язки  $ka_0$  підставляємо у друге рівняння системи (5.32). У результаті отримуємо два значення енергії, як функції проникності бар'єру  $\Omega a_0$ :

$$E_1 = 0, \quad E_2 = \frac{\hbar^2}{2m_0 a_0^2} 6 \left( 1 - \frac{1}{\Omega a_0} \right)^2. \quad (5.33)$$

Ширина першої забороненої зони у модифікованій моделі Кроніга-Пені визначиться, як

$$E_{K-P}^{gap} = E_2 - E_1. \quad (5.34)$$

Узгодимо моделі Кроніга-Пені і Тама умовою  $\Omega a_0 = p$  [79-81] і виразимо параметр  $p$  через ширину забороненої зони  $E_{K-P}^{gap}$  з урахуванням (5.33), (5.34):

$$\frac{1}{\Omega a_0} \equiv \frac{1}{p} = 1 - a_0 \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} \frac{E_{K-P}^{gap}}{6}}. \quad (5.35)$$

Крім цього завдяки неузгодженості параметрів ґраток на гетеромежі КТ-матриця параметр кристалічної ґратки матеріалу КТ буде змінюватися, як

$$a_0^{def}(a) = a_0 \left( 1 - |\varepsilon^{(1)}(a)| \right). \quad (5.36)$$

З урахуванням формули (5.36) замість параметра недеформованої кристалічної ґратки  $a_0$  підставляємо  $a_0^{def}$  у формули (5.29)-(5.35).

У межах цієї моделі енергетичну відстань між дном потенціальної ями і енергетичним рівнем  $E_{1s}$  називаємо першою «забороненою» електронною зоною у потенціальній ямі (електрон-діркова взаємодія не враховується). Тому цю відстань вважатимемо як  $E_{K-P}^{gap}$ , тобто  $E_{K-P}^{gap} = E_{1s}$ . З урахуванням останньої умови вираз для параметра  $p$  (5.35) підставимо у рівняння (5.29), з якого знаходимо енергію поверхневого рівня Тамма на гетеромежі КТ-матриця.

Нижче приведені числові розрахунки енергій основного стану (лінії 1',1) і першого збудженого (лінії 2',2) та енергії поверхневого рівня Тамма (лінії 3',3)

межі КТ (*InAs*) – матриця (*GaAs*) для наногетеросистеми *InAs/GaAs*. Як видно з представлених графічних залежностей енергії від розміру КТ зменшення розміру КТ приводить до монотонного зростання енергії основного та першого збудженого станів електрона в об'ємі КТ як з урахуванням взаємодії деформації ґратки та електронної підсистеми, так і без неї.

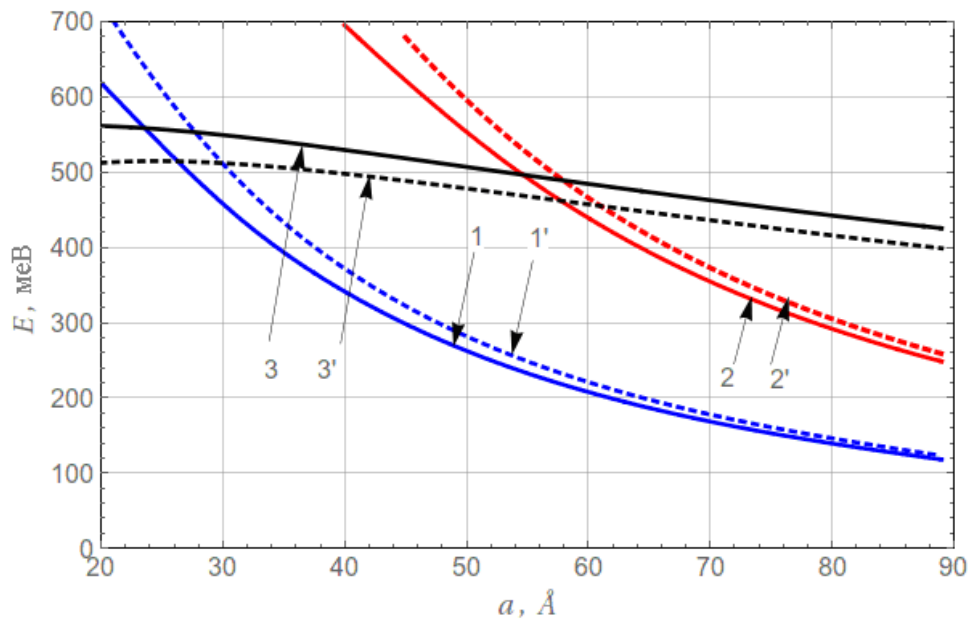


Рисунок 5.9 Енергії основного (лінії 1,1') та першого збудженого (лінії 2, 2') станів електрона з урахуванням взаємодії деформації ґратки та електронної підсистеми (лінії 1, 2) та без неї (лінії 1', 2') як функції розміру КТ. Лініями 3, 3' позначено енергію електрона на гетеромежі КТ-матриця (енергія рівня Тамма) з урахуванням взаємодії деформації ґратки та електронної підсистеми і без неї відповідно

Зокрема, коли розмір КТ становить  $30\text{Å}$  різниця між енергетичними рівнями основного стану з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії і без неї становить 50 меВ.

Аналіз графічної залежності (рис.5.9, криві 3,3') енергії стану електрона на гетеромежі КТ-матриця (енергія рівня Тамма) показує, що при зменшенні

розмірів КТ енергія поверхневого рівня Тамма на гетеромежі *InAs/GaAs* з урахуванням електрон-деформаційної взаємодії є більшою від відповідної енергії без її урахування. Це зумовлено деформацією стиску матеріалу КТ (5.36). Це спричинює збільшення ступеня перекриття електронних хвильових функцій окремих атомів на гетеромежі КТ-матриця. У результаті цього зростає енергія електростатичної взаємодії електронів. Отже, для розмірів КТ ( $a \leq 25 \text{ \AA}$ ) визначальну роль у заповненні електронних рівнів відіграють стани на гетеромежі КТ-матриця. На експерименті це відобразиться на структурі кривої фотолюмінесценції, зокрема появою додаткового піку в довгохвильовій області видимого оптичного спектру [69].

## Висновки до розділу 5

1. Встановлено, що за однакових розмірів КТ енергія поверхневого стану електрона в КТ *CdSe* гетеросистеми *CdSe/SiO<sub>2</sub>* є більшою за відповідну енергію електрона у КТ *CdTe* гетеросистеми *CdTe/SiO<sub>2</sub>*, що зумовлено глибшою поверхневою поляризаційною ямою для наногетеросистеми *CdTe/SiO<sub>2</sub>* з КТ *CdTe*, внаслідок більшої різниці діелектричних проникностей між матеріалом КТ (*CdTe*) і матрицею (*SiO<sub>2</sub>*).
2. Показано, що формування поверхневих станів електрона на гетеромежі *CdSe/SiO<sub>2</sub>* відбувається при менших розмірах КТ (*CdSe*), ніж у випадку наногетеросистеми *CdTe/SiO<sub>2</sub>*.
3. Встановлено, що енергія таммівського стану електрона на напруженій гетеромежі КТ-матриця (*InAs/GaAs*) є більшою від відповідної енергії не напруженої КТ, що зумовлено збільшенням ступеня перекриття електронних хвильових функцій на гетеромежі КТ-матриця внаслідок деформації стиску.

## ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі з урахуванням поляризаційного та деформаційного потенціалів розвинуто теорію формування електронних станів на гетеромежі квантова точка-матриця ( $CdSe/SiO_2$ ,  $CdS/SiO_2$ ,  $CdTe/SiO_2$ ,  $InAs/GaAs$ ) за наявності донорних та акцепторних домішок у квантовій точці; досліджено в межах чотиризонного наближення вплив акцепторних і донорних домішок на спектральний коефіцієнт поглинання наногетеросистемами з квантовими точками ( $CdSe/SiO_2$ ,  $CdS/SiO_2$ ,  $CdTe/SiO_2$ ) в залежності від розмірів квантових точок.

1. Досліджено закономірність зміни енергії дірки від координатного положення акцепторної домішки у квантовій точці ( $CdSe$ ) в наногетеросистемі  $CdSe/SiO_2$ . Показано, що у випадку нецентрального положення акцепторної домішки у квантовій точці має місце часткове зняття виродження енергетичних рівнів дірки за магнітним квантовим числом за рахунок пониження сферичної симетрії кристалічної ґратки квантової точки.
2. Показано, що квантова точка з двома водневоподібними акцепторними домішками має дві смуги поглинання за рахунок розщеплення діркових рівнів, що зумовлене пониженням симетрії кристалічної ґратки сферичної квантової точки  $CdSe/SiO_2$ . Ці смуги зміщуються у довгохвильову область інфрачервоного спектру.
3. Встановлено, що як іон донорної домішки, так і потенціальна пастка на гетеромежі  $CdS/SiO_2$  індукують поверхневі електронні стани квантової точки на гетеромежі  $CdS/SiO_2$ .
4. Встановлено, що у спектральному діапазоні ( $1,24 \text{ мкм} \leq \lambda \leq 1,55 \text{ мкм}$ ) коефіцієнт поглинання світла квантовою точкою з донорною домішкою у наногетеросистемі  $CdS/SiO_2$ , зумовлений електронними переходами



$1s \rightarrow 1p$  в об'ємі квантової точки, є на п'ять порядків більшим за коефіцієнт поглинання світла у діапазоні ( $0,517 \text{ мкм} \leq \lambda \leq 0,539 \text{ мкм}$ ), зумовленого електронними переходами між об'ємним  $1s$  та поверхневим  $2p$ -станами ( $1s \rightarrow 2p$ ).

5. Розраховано залежність енергії утворення екситона ( $E_X$ ) та екситон-домішкових комплексів з іоном донора ( $E_{D^{+}X}$ ), іоном акцептора ( $E_{A^{-}X}$ ) та з нейтральними домішками ( $E_{A^0-X}$ ,  $E_{D^0-X}$ ) у наногетеросистемі  $\text{CdS}/\text{SiO}_2$  від розміру квантової точки. Показано, що для квантової точки розміром  $17 \text{ \AA}$  енергія утворення екситона ( $E_X$ ) є на  $10 \text{ меВ}$  більшою за енергію утворення екситон-домішкового комплексу з іоном донора ( $E_{D^{+}X}$ ), а для розміру  $21,5 \text{ \AA}$  ця різниця складає  $9 \text{ меВ}$ . Тоді як у квантовій точці розміром  $17 \text{ \AA}$  енергія утворення екситон-домішкового комплексу  $D^0-X$  є меншою на  $11 \text{ меВ}$  за відповідну енергію екситон-домішкового комплексу  $A^{-}X$ , а для розміру квантової точки  $21,5 \text{ \AA}$  утворення екситон-домішкового комплексу  $D^0-X$  є більшою на  $10 \text{ меВ}$  за відповідну енергію екситон-домішкового комплексу  $A^{-}X$ .
6. Встановлено, що смуга сумарного спектрального коефіцієнта поглинання світла квантовими точками з розмірами  $17 \text{ \AA}$  та  $21,5 \text{ \AA}$  у наногетеросистемі  $\text{CdS}/\text{SiO}_2$ , зумовленого екситонами та екситон-домішковими комплексами ( $D^{+}X$ ,  $D^0X$ ,  $A^{-}X$ ,  $A^0X$ ), характеризується двома максимумами, які припадають на довжини хвиль  $420 \text{ нм}$  і  $450 \text{ нм}$  відповідно. Ці два максимуми зумовлені формуванням екситонів ( $X$ ) та екситонних комплексів ( $D^{+}X$ ,  $D^0X$ ,  $A^{-}X$ ).
7. Встановлено, що на напруженій гетеромежі квантова точка-матриця ( $\text{InAs}/\text{GaAs}$ ) енергія таммівського стану електрона є більшою від відповідної енергії ненапруженої квантової точки, що зумовлено збільшенням ступеня перекриття електронних хвильових функцій на гетеромежі унаслідок деформації стиску матеріалу квантової точки.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Дзюба В.П. Квантово-размерные состояния деформированной наносферы / В.П. Дзюба, Ю.Н. Кульчин, В.А. Миличко // ФТТ. – 2014. – Т. 56, №2. – С.355–361.
2. Пелешак Р.М. Самоорганизованный диффузионно-деформационный розподіл точкових дефектів у напружених гетеросистемах / Р.М. Пелешак, О.В. Кузик // УФЖ. – 2007. – Т.52, № 7. – С.689–694.
3. Li H.W. Hysteresis in electronic transport through an ensemble of InAs self-assembled quantum dots / H.W. Li, T.H. Wang // Physica B. – 2001. – V.301, № 3-4. – P.174–179.
4. Васильев Ю.Б. Влияние качества гетерограниц на спектры циклотронного резонанса гетероструктур InAs/(AlGa)Sb / Ю.Б. Васильев, С.Д. Сучалкин, С.В. Иванов // ФТТ. – 1997. – Т. 31, №10. – С.1246–1248.
5. Вакуленко О.В. Вплив дефектних станів інтерфейсу на фотоелектричні властивості гетероструктур  $In_xGa_{1-x}As/GaAs$  з квантовими точками / О.В. Вакуленко, С.Л. Головинський, С.В. Кондратенко // УФЖ.– 2011.– Т.56, №9. – С.944–951.
6. Ландау Л.Д. Теория упругости / Л.Д.Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Наука, 1965. – 204 с.
7. Downes J.R. A simple method for calculating strain distributions in quantum dot structures / J.R. Downes, D.A. Faux, E.P. O'Reilly // J. Appl. Phys. – 1997.– V. 81, № 10. – P. 6700–6702.
8. Pearson G.S. Analytical solutions for strain in pyramidal quantum dots / G.S. Pearson, D.A. Faux // J. Appl. Phys.– 2000.– V. 88, № 2.– P. 730–736.
9. Лифшиц И.М. О построении тензора Грина для основного уравнения теории упругости в случае неограниченной упруго-анизотропной среды / И.М. Лифшиц, Л.Н. Розенцвейг // ЖЭТФ.– 1947.– Т. 17, №9.– С.783–791.

10. Faux D.A. Green's tensors for anisotropic elasticity: Application to quantum dots / D.A. Faux, G.S. Pearson // *Phys. Rev. B.* – 2000. – V. 62, № 8. – P. R4798–4801.
11. Strain distributions in quantum dots of arbitrary shape / A.D. Andreev, J.R. Downes, D.A. Faux [et al.] // *J. Appl. Phys.* – 1999. – V. 86, № 1. – P. 297–305.
12. Бойчук В.І. Вплив сил зображень на енергетичний спектр електрона у складному сферичному мікрокристалі  $CdS/\beta-HgS/H_2O$  / В.І. Бойчук, Р.Ю. Кубай, І.В. Білінський // *ЖФД.* – 1999. – Т. 3, № 2. – С. 187-191.
13. Бойчук В.І. Влияния промежуточного слоя с переменной от координаты диэлектрической проницаемостью на энергию основного состояния электрона в сферической сложной наногетеросистеме / В.І. Бойчук, Р.Ю. Кубай // *ФТТ.* – 2001. – Т. 43, № 2. – С. 226-232.
14. 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.
15. Boichuk V.I. The effect of the polarization charges on the optical properties of a spherical quantum dot with an off-central hydrogenic impurity / V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, R.Ya. Leshko // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures.* – 2011. – Vol .44, P 476–482.
16. Boichuk V.I. Ground and excited states of  $D^0$  and  $D^-$  donors in a spherical quantum dot / V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, R.Ya. Leshko // *Ukr. J. Phys.* – 2008. – Vol. 53, № 10. – P. 991-996.
17. Boichuk V.I. 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.
18. Boichuk V.I. Optical properties of a spherical quantum dot with two ions of hydrogenic impurity / V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, R.Ya. Leshko // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures.* – 2013. – Vol .54, P 281-287

19. 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.
20. Ткач Н.В. Свойства электронного спектра в двухъямной закрытой сферической квантовой точке и его эволюция при изменении толщины внешней ямы / Н.В. Ткач, Ю.А. Сети // *ФТП*. – 2006. – Т. 40, № 9. С. 1111-1119.
21. Tkach M.V. Exciton in closed and opened quantum dot / M.V. Tkach, Ju.O. Seti // *Condensed Matter Physics*. – 2007. – Vol. 10, № 1(49). – P. 23-31.
22. Leshko R.Ya. The hole energy spectrum of an open spherical quantum dot within the multiband model / R.Ya. Leshko, I.V. Bilynskiy // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. – 2019. – Vol. 110, P 10-14.
23. Boichuk V.I. Stationary and quasistationary states of hydrogenic impurity in a spherical quantum antidot / V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, R.Ya. Leshko // *Ukr. J. Phys.* – 2009. – Vol. 54, № 10. – P. 1021-1026.
24. 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.
25. 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).
26. Boichuk V.I. The influence of electron-hole exchange interaction of colloidal CdS quantum dots on the value of the resonant stokes shift / V.I. Boichuk, R.Ya. Leshko, O.A. Sokolnyk // *Physics and Chemistry of Solid State* – 2019. – Vol. 20, № 3 – P. 227-233. – 2016. – Vol. 17, № 1. – P. 11-20.
27. Hole states in spherical quantum nanoheterosystem with intermediate spin-orbital interaction / I.V Bilynskiy, R.Ya. Leshko, H.O. Metsan, I.S. Shevchuk // *Physics and Chemistry of Solid State* – 2019. – Vol. 20, № 3 – P. 227-233.

28. 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.
29. Luttinger J.M. Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors: General theory / J.M. Luttinger // Phys. Rev. – 1956. – Vol. 102, № 4. – P. 1030-1041
30. 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.
31. 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.
32. Pokatilov E.P. Development of an eight-band theory for quantum dot heterostructures / E.P. Pokatilov, V.M. Fomin, J.T. Devreese // Phys. Rev. B. – 2001. – Vol. 64, № 24. – P. 245328-245344.
33. Rodina A.V. General boundary conditions for the envelope function in the multiband *kp* model / A.V. Rodina, A.Yu. Alekseev, Al.L. Efros // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 65, № 12. – P. 125302-125314
34. Moskalenko A.S. Single-particle states in spherical *Si/SiO<sub>2</sub>* quantum dots / A.S. Moskalenko, J. Berakdar, A.A. Prokofiev // Phys. Rev. B. – 2007. – Vol. 76, № 8. – P. 085427-085436
35. Boichuk V.I. Interband optical transitions in spherical nanoheterostructures / V.I. Boichuk, I.V. Bilynskyi, I.O. Shakleina // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics. – 2005. – Vol. 8, № 4. – P. 26-32.
36. Бойчук В.І. Спектри дірок та акцепторів у закритій двошаровій сферичній квантовій точці / В.І Бойчук, І.В. Білинський, Р.Я. Лешко // Фізика і хімія твердого тіла. – 2010. – Т. 11, № 4. – С. 935-943.

37. 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.
38. Watanabe K. Resonant excitation of  $Er^{3+}$  by the energy transfer from *Si* nanocrystals / K. Watanabe, M. Fujii, S. Hayashi // *J. Appl. Phys.* – 2001. – Vol. 90, № 9. – P. 4761-4766.
39. Wolkin M.V. Electronic states and luminescence in porous silicon quantum dots: the role of oxygen / M.V. Wolkin, J. Jorne, P.M. Fauchet // *Phys. Rev. Lett.* – 1999. – Vol. 82, № 1. – P. 197-200.
40. Kanzawaa Y. Size-dependent near-infrared photoluminescence spectra of *Si* nanocrystals embedded in  $SiO_2$  matrices / Y. Kanzawaa, T. Kageyamaa, S. Takeokaa [and al.] // *Solid State Commun.* – 1997. – Vol. 102, № 7. – P. 533-537.
41. Guha S. Characterization of *Si* nanocrystals grown by annealing  $SiO_2$  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.
42. Quantum Dots for Live Cells, in Vivo Imaging, and Diagnostics / X. Michalet, F. F. Pinaud, L. A. Bentolila, J. M. Tsay, S. Doose, J. J. Li, G. Sundaresan, A. M. Wu, S. S. Gambhir, and S. Weiss // *Science.* – 2005. – Vol. 28. – P. 538-544.
43. Світловипромінюючі властивості квантових точок напівпровідникових сполук  $A_2B_6$  / Д. В. Корбутяк, О. В. Коваленко, С. І. Будзуляк, С. М. Калитчук, І. М. Купчак. // *Укр. фіз. журн. Огляди.* – 2012. – Т.7, № 1. – С. 48-95.
44. Felix Koberling. Single-dot spectroscopy of CdS nanocrystals and CdS/HgS heterostructures / Felix Koberling, Alf Mews, and Thomas Basché // *Phys. Rev. B.* – 1999. – Vol. 60, № 3. – P. 1921-1927.

45. Wei Wu. A voltage tunable quantum dot photodetector for terahertz detection / Wei Wu, Dibyendu Dey and Hooman Mohseni // *J. Phys. D* – 2010. – Vol. 43. – P. 155101(6 p.).
46. Wei Wu. Modeling of an electrically tunable quantum dot photodetector for terahertz detection / Wei Wu, Dibyendu Dey, Omer G. Memis, and Hooman Mohseni // *Proc. of SPIE* – 2010. – Vol. 7601. – P. 760109(1)-760109(9).
47. Radmila Kostic and Dusanka Stojanovic. Nonlinear absorption spectra for intersubband transitions of *CdSe/ZnS* spherical quantum dots // *Journal of Nanophotonics*. – 2011. – Vol. 5. – P. 051810(1)-051810(9).
48. Boyed R. *Nonlinear optics* / Boyed R. – Elsevier, 2008. – 613 с.
49. Vahdani M.R.K. Linear and nonlinear optical properties of a hydrogenic donor in lens-shaped quantum dots / M.R.K.Vahdani and G. Rezaei // *Physics Letters A*. – 2009. – Vol. 373, № 34. – P. 3079-3084.
50. Rezaei G. Nonlinear optical properties of a hydrogenic impurity in an ellipsoidal finite potential quantum dot / Rezaei G., Vahdani M.R.K., and Vaseghi B. // *Current Applied Physics*. – 2011. – Vol. 11, № 2. – P. 176–181.
51. Суздаев И.П. Физикохимия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов / И. П. Суздаев. – 2006. – Москва: КомКнига, – 365 с.
52. Пул Ч. Нанотехнологии / Ч. Пул, Ф. Оуэнс - 2004. – Москва: Техносфера, 189 с.
53. Colloidal synthesis of nanokristals and nanokrystal superlattices. / Murray C. B., Sun S., Gaschler W., Doyle H., Betley T. A., Kagan C. R. // *IBM J. Res. and Dev.* – 2001. – Vol. 45. – P. 47-56.
54. Chemistry and properyies of nanocrystals of different shapes / C. Burda, X. Chen, R. Nazayanan, M.A. El-Sayed // *Chem. Phys.* – 2005. – Vol 105. – P. 1025-1102.
55. Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры / Н. Н. Леденцов, В. М. Устинов, В. А.Щукин, П. С. Копьев, Ж. И. Алферов, Д. Бимберг // *ФТП*. – 1998. – Т. 32, № 4. – С. 358-410.

56. Bimberg G. Quantum Dot Heterostructures / G. Bimberg, M. Grundmann, N.N. Ledentsov – 1999. – N.Y.: Wiley, 354 p.
57. Moll N. Influence of surface stress on the equilibrium shape of strained quantum dots / N. Moll and M. Scheffler, E. Pehlke / Phys. Rev. B. – 1998. – Vol. 58, No 8. – P. 4566–4571.
58. Mukhametzhanov I. Punctuated island growth: An approach to examination and control of quantum dot density, size, and shape evolution / I. Mukhametzhanov, Z. Wei, R. Heitz // Appl. Phys. Lett. – 1999. – Vol. 75, № 1. – P. 85-86.
59. Márquez J. Atomically resolved structure of InAs quantum dots / J. Márquez, L. Geelhaar and K. Jacobi // Appl. Phys. Lett. – 2001. – Vol. 78, No 16. – P. 2309-2311.
60. Шкловский Б.И. Электронные свойства легированных полупроводников / Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. – Москва: Наука, 1979, – 416 с
61. Гельмонт Б.Л. Акцепторные уровни в полупроводниках со структурой алмаза / Б.Л. Гельмонт, М.И. Дьяконов // ФТП. – 1971. – Т 5, № 11. – С. 2191-219
62. 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.
63. Madelung O. Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology / O. Madelung – vol. III/22 (Springer, Berlin, 1986).
64. Laheld U. E. H. Excitons in CdSe quantum dots / U. E. H. Laheld and G. T. Einevoll // Phys. Rev. B. – 1997. – Vol. 55, № 8. – P. 5184–5204.
65. Menéndez-Proupin E. Resonant hyper-Raman scattering in spherical quantum dots / E. Menéndez-Proupin, C. Trallero-Giner, A. García-Cristobal // Phys. Rev. B. 1999. — Vol. 60, № 8. – P. 5513–5522.



66. Off-central acceptor impurity in a spherical quantum dot / V.I. Boichuk, R.Ya. Leshko, I.V. Bilynskyi, L.M. Turyanska // *Condensed Matter Physics*. – 2012. – Vol. 15, № 3. – P. 33702(1)-33702(10).
67. Hässelbarth A. Detection of shallow electron traps in quantum sized CdS by fluorescence quenching experiments / A.Hässelbarth, A.Eychmüller, H.Weller // *Chemical Physics Letters*. – 1993. – V.203, No2-3. – P. 271-276.
68. Gerald Bastard. *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures* / Gerald Bastard. – Les Éditions de Physique, 1988. – 357 p.
69. Купчак І.М. Зсув Стокса у квантових точках *CdTe* / І.М. Купчак, Д.В. Корбутяк, С.М. Калитчук // *Журнал фізичних досліджень*. – 2010. – Т. 14, №2. – С. 2701(1-10).
70. Efros Al. L. Band-edge exciton in quantum dots of semiconductors with a degenerate valence band: Dark and bright exciton states / Al. L. Efros and M. Rosen // *Phys Rev B*. – 1996. – V.54, No 7. – P. 4843-4856.
71. Boichuk V.I. Dielectric mismatch in finite barrier cubic quantum dots / V.I. Boichuk, I.V. Bilynskyi, I.O. Shakleina, I. Kogoutiuk // *Physica E*. – 2010. – V.43, No 1. – P. 161-166.
72. Photoluminescence of CdS/ZnS Core/Shell Quantum Dots / D.F.Fanga, Z.M.Zhangb, Z.P.Wangb, Z.J.Dinga // *Physics Procedia*. – 2012. – V. 32. – P. 920-925.
73. Савчук А.Й. Вплив легування колоїдних наночасток CdS домішкою Mn на спектри фотолюмінесценції / А.Й. Савчук, В.В. Маковій // *Науковий вісник Чернівецького національного університету*. – 2012. – Т.2, В.1. – Фізика. Електроніка. – С. 66-68.
74. Калиткин Н.Н. Численные методы / Н.Н. Калиткин. – М.: Наука – 1978 – 512 с.
75. Otfried Madelung. *Semiconductors: Data Handbook*. – Springer Science & Business Media, 2004 – P. 691.

76. Dan'kiv O.O. Strain-renormalized energy spectra of electrons and holes in InAs quantum dots in the *InAs/GaAs* heterosystem / O.O. Dan'kiv, R.M. Peleshchak // *Technical Physics Letters*. – 2005. – Vol. 31, № 8. – P. 691–694.
77. Dan'kiv O.O. Influence of impurity on electronic transition in coherent-strained quantum dot / O.O. Dan'kiv, R.M. Peleshchak // *Functional Materials*. – 2006. – Vol. 13, № 1. – P. 14-20.
78. Baric properties of InAs quantum dots / B.V. Novikov, G.G. Zegrya, R.M. Peleshchak, O.O. Dan'kiv, V.A. Gaisin, V.G. Talalaev, I.V. Shtrom, G.E. Cirlin // *Semiconductors*. – 2008. – Vol. 42, № 9. – P. 1076-1083.
79. Тамм И.Е. Собрание научных трудов / И.Е. Тамм – 1975. – М.: Наука, 440 с.
80. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. Пер. с англ. / Под ред. А.А. Соколова. – 1974. М.: Мир, 343 с.
81. Оксенгендлер Б.Л. Роль конфайнмента электронов в формировании поверхностных уровней Тамма в наночастицах / Б.Л. Оксенгендлер, Б. Аскарлов, В.Н. Никифоров // *Журнал технической физики*. – 2014 – Т. 84, № 10. – С. 156-158.

## Додаток

### Список публікацій здобувача за темою дисертації

11. Boichuk V.I. The Effect of Shallow Impurities on the Light Absorption by the Nanocrystals CdS / V.I. Boichuk, R.Ya. Leshko, D.S. Karpyn // UJP. – 2018. – V. 63, No 12. – P. 1088-1094.
12. Boichuk V.I. Analysis of the effect of polarization traps and shallow impurities on the interlevel light absorption of quantum dots / V.I. Boichuk, R.Ya. Leshko, D.S. Karpyn // Condensed Matter Physics. – 2017. – V. 20, № 4. – P. 43704: 1-8.
13. Boichuk V.I. The effect of the neighboring impurity ion on the acceptor interlevel light absorption by CdSe nanocrystal / V.I. Boichuk, R.Ya. Leshko, V. B. Holskyi, D.S. Karpyn // Journal of Physical Studies. – 2016. – V. 20, № 3. – P. 3701(1)-(7).
14. Boichuk V.I. Light absorption of small CdS quantum dots / V.I. Boichuk, R.Ya. Leshko, D.S. Karpyn // Sensor Electronics and Microsystem Technologies. – 2017. – Т. 14. – № 1. – С. 21-30.
15. Бойчук В.І. Поверхневі стани у сферичних нанокристалах CdSe, CdTe / В.І. Бойчук, Р.Я. Лешко, Д.С. Карпин // Sensor Electronics and Microsystem Technologies. – 2018. – Т. 15. – № 1. – С. 5-16.
16. Boichuk V.I. Optical spectra of small CdS nanocrystals / V. I. Boichuk, R.Ya. Leshko, V.B. Holskyi, D.S. Karpyn // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics. – 2016. – V. 6, № 4. – P. 384-390.
17. Peleshchak R.M. Influence of the quantum dot material deformation on Tamm surface levels / R.M. Peleshchak, R.Ya. Leshko, D.S. Karpyn // Sensor electronics and microsystem technologies. – 2020. – Vol 17, № 3. – P. 5-13.

18. Boichuk V. I. Interlevel absorption of electromagnetic waves caused by the polarization traps and shallow impurities / V.I. Boichuk, R.Ya. Leshko, D.S. Karpyn // International conference “Laser technologies. Lasers and their application”, Truskavets, 07.06.17 – 09.06.17. – P. 139-141.
19. Boichuk V.I. Effect of polatization traps, donor and acceptor impurities on the intraband and interband light absorption of quantum dots / V.I. Boichuk, R.Ya. Leshko, D.S. Karpyn, I.I. Ivanchushyn, I.P Toma // Abstract book of the X International conference on topical problems of semiconductor physics (Truskavets, Ukraine, June 26 – 29, 2018). – Truskavets, 2018. – P. 14-16.
20. Бойчук В.І. Вплив мілких домішок на поглинання і люмінесценцію квантових точок CdS / В.І. Бойчук, Р.Я. Лешко, Д.С. Карпин, І.І. Іванчишин, І.П. Тома // Сенсорна електроніка та мікросистемні технології: Тези доповідей 8-ої Міжнародної науково-технічної конференції (Одеса, 28 травня – 1 червня 2018 р.). – Одеса, 2018. – С. 53.