ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 7, № 2 (2003) с. 188–194

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 7, No. 2 (2003) p. 188–194

МЕТОД БЕТЕ В ТЕОРІЇ ЛОКАЛІЗОВАНОГО ЕКСИТОНА У СФЕРИЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧКАХ, РОЗТАШОВАНИХ У МАСИВНОМУ СЕРЕДОВИЩІ

М. В. Ткач, Я. М. Березовський
Чернівецький національний університет,
вул. Коцюбинського, 2, Чернівці, 58012, Україна
(Отримано 3 червня 2003 р.; в остаточному вигляді — 19 вересня 2003 р.)

Уперше на основі варіяційного методу Бете, який дозволяє враховувати не лише дискретні стани неперервного спектра, розвинута загальна теорія екситонного спектра у сферичних квантових точках, розташованих у масивному середовищі.

Ключові слова: наногетеросистема, екситон.

PACS number(s): 63.20.Dj, 79.60.Jv

I. ВСТУП

Локалізований екситон у сферичних квантових точках, розташованих у масивному середовищі, докладно вивчали в багатьох працях [1–9]. Вони ґрунтуються на двох підходах: мікроскопічному [1] і макроскопічному [2–9]. Мікроскопічні моделі детально враховують молекулярно-атомарну структуру КТ і є математично складними та громіздкими. Макроскопічні моделі іґнорують детальну структуру середовищ і базуються на використанні таких параметрів, як ефективні маси квазічастинок, діелектричні проникності складових елементів наносистеми та потенціял квазічасток у КТ стосовно навколишнього середовища.

Якщо спектр і хвильові функції локалізованого екситона знаходимо варіяційним методом Рітца або його різновидами [7], то отримані результати виявляються задовільними для КТ і великих, і малих розмірів. Однак при цьому добрі пробні хвильові функції містять так багато варіяційних параметрів і є настільки складними, що використовувати їх при побудові теорії екситон-фононної взаємодії стає практично неможливо.

Найпростіше екситонний спектр і хвильові функції отримати методом теорії збурень, коли енерґія електрона і дірки є малою в розумінні теорії збурень. З фізичних міркувань зрозуміло, що умови застосовности теорії збурень погіршуватимуться при зменшенні радіуса квантової точки, внаслідок чого електрон і дірка будуть зближатися й енерґія їх взаємодії збільшуватиметься.

З теорії атомних спектрів відомо, що значно поліпшує результати теорії збурень метод Бете [10], у якому варіяційні параметри вводяться в гамільтоніян системи. У такій теорії набір хвильових функцій є достатньо простим, щоб їх використовувати для дослідження взаємодій квазічастинки з іншими підсистемами (зокрема фононною), а спектр значно точніший, ніж у теорії збурень.

Метою цієї роботи є побудова різновиду варіяційної теорії Бете в застосуванні до екситона, локалізованого у квантовій точці, що розташована в масивному середовищі. Для цього буде введено фіктивні заряди в центр сферичної наногетеросистеми, у ефективному полі яких і рухаються екситонні електрон і дірка.

II. ГАМІЛЬТОНІЯН, СПЕКТР ТА ХВИЛЬОВІ ФУНКЦІЇ ЛОКАЛІЗОВАНОГО ЕКСИТОНА У ПРОСТІЙ ЗАКРИТІЙ СФЕРИЧНІЙ НАНОГЕТЕРОСИСТЕМІ

Розгляньмо напівпровідникову сферичну квантову точку радіусом r_0 з діелектричною проникністю $\mathcal{E}_0$, яка вміщена в масивне напівпровідникове середовище з діелектричною проникністю $\mathcal{E}_1$. У такій наногетеросистемі може утворюватися локалізований екситон, який складається з електрона та дірки, що характеризуються радіус-векторами $\mathbf{r}_e$ і $\mathbf{r}_h$ відповідно, ефективними масами $m_e(\mathbf{r})$ і $m_h(\mathbf{r})$, потенціяльними бар'єрами щодо навколишнього середовища V_e, V_h та енерґією взаємодії кулонівського типу з діелектричною проникністю $\epsilon(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$ (рис. 1).

У сферичній системі координат з початком у центрі наносистеми ефективні маси й потенціяли вважаються відомими експериментально вимірюваними параметрами.

$$m_i(r_i) = \begin{cases} m_0^i, & r_i < r_0, \\ m_1^i, & r_i \geq r_0. \end{cases}, \quad i = e, h \tag{1}$$

$$U_i(r_i) = \begin{cases} 0, & r_i < r_0, \\ V_i, & r_i \geq r_0. \end{cases}, \quad i = e, h \tag{2}$$

Отже, гамільтоніян екситона можна записати так:

$$H = E_g + T_e + U_e + T_h + U_h - \frac{e^2}{\mathcal{E}|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|}, \tag{3}$$

де E_g — енерґія забороненої зони масивного кристала, з якого утворена квантова точка, $T_{e,h}$ та $U_{e,h}$ — кінетичні та потенціяльні енерґії електрона й дірки відповідно.

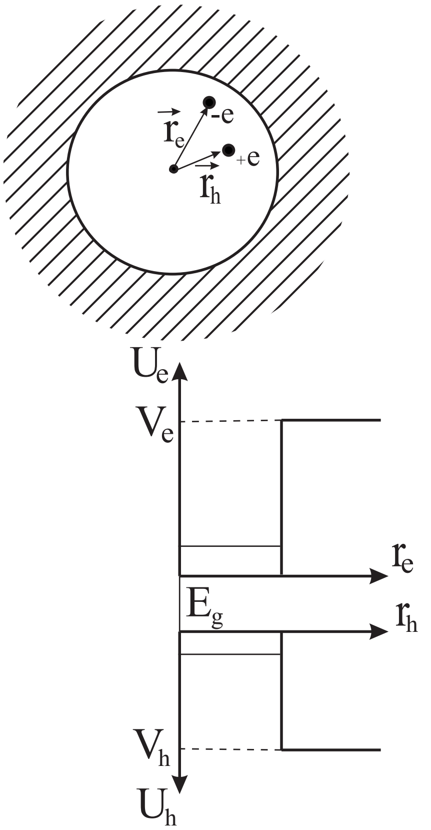

Рис. 1. Геометрична й енерґетичні схеми локалізованого екситона.

Розв'язати рівняння Шрединґера з гамільтоніяном (3) неможливо, тому використаємо метод Бете [10]. Для системи, яку вивчаємо, метод Бете можна модифікувати так. Оскільки електрон і дірка рухаються в центрально-симетричному полі КТ, то густина розподілу ймовірности їх розташування у просторі КТ розподілена так, що заряд кожної з квазічастинок ніби "розмивається" по простору КТ. Тому, за аналогією до методу Бете для атомних задач, наближено можна вважати, що "розмиття" еквівалентне дії деякого ефективного заряду ($\sqrt{\beta_i}e$), який розташований у центрі КТ. Отже, увівши фіктивні заряди в центр квантової точки, подамо гамільтоніян (3) в еквівалентному вигляді

$$H = H_e + H_h + W + E_g, \tag{4}$$

де

$$H = -\frac{\hbar^2}{2}\nabla_i \frac{1}{m_i(r_i)}\nabla_i - \frac{\beta_i e^2}{\mathcal{E}(r_i)r_i} + U_i(r_i) \quad (i = e, h) \tag{5}$$

— гамільтоніяни електрона ($i = e$) чи дірки ($i = h$), які взаємодіють з відповідним фіктивними зарядами ($\beta_i e$), розташованими в центрі квантової точки.

$$W = \frac{\beta_e e^2}{\mathcal{E}(r_e)r_e} + \frac{\beta_h e^2}{\mathcal{E}(r_h)r_h} - \frac{e^2}{\mathcal{E}(r_e, r_h)|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \tag{6}$$

— потенціяльна енерґія, яка відіграє роль збурення.

Рівняння Шрединґера з центрально-симетричними гамільтоніянами (5) для електрона чи дірки ($i = e, h$), що знаходяться в полі відповідних фіктивних зарядів ($\beta_i e$), які перебувають у центрі квантової точки,

$$\begin{aligned} &H_0^i(r_i, \beta_i)\Psi_{n_i,l_i,m_i}(\beta_i, \mathbf{r}_i) \\ &= E_{n_i,l_i}(\beta_i)\Psi_{n_i,l_i,m_i}(\beta_i, \mathbf{r}_i) \end{aligned} \tag{7}$$

має точний розв'язок для енерґетичного спектра E_{n_i,l_i} та нормованих хвильових функцій, які, природно, також мають центральну симетрію

$$\Psi_{n_i,l_i,m_i}(\beta_i, \mathbf{r}_i) = R_{n_i,l_i}(\beta_i, r_i)Y_{l_i,m_i}(\theta_i, \phi_i). \tag{8}$$

Тут $Y_{l_i,m_i}(\theta_i, \phi_i)$ — сферичні функції, а явний аналітичний вигляд радіяльних функцій $R_{n_i,l_i}(\beta_i, r_i)$ (як і енерґетичний спектр E_{n_i,l_i}) буде отримано в наступному параграфі.

Вибравши хвильові функції екситона у вигляді

$$\begin{aligned} &\Psi^{n_h,l_h,m_h}_{n_e,l_e,m_e}(\beta_e, \beta_h, \mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) \\ &= \Psi_{n_e,l_e,m_e}(\beta_e, \mathbf{r}_e)\Psi_{n_h,l_h,m_h}(\beta_h, \mathbf{r}_h), \end{aligned} \tag{9}$$

отримаємо з (5) функціонал

$$\begin{aligned} E^{n_h,l_h,m_h}_{n_e,l_e,m_e}(\alpha_e, \alpha_h) &= \int\int \Psi^{*n_h,l_h,m_h}_{n_e,l_e,m_e}(\beta_e, \beta_h, \mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)H(\beta_e, \beta_h, \mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)\Psi^{n_h,l_h,m_h}_{n_e,l_e,m_e}(\beta_e, \beta_h, \mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_h \\ &= E_g + E_{n_el_e}(\beta_e) + E_{n_hl_h}(\beta_h) + \Delta_{n_el_e}(\beta_e) + \Delta_{n_hl_h}(\beta_h) + \Delta^{n_h,l_h,m_h}_{n_e,l_e,m_e}(\beta_e, \beta_h) \end{aligned} \tag{10}$$

де

$$\Delta_{n_i,l_i}(\beta_i) = \mathcal{E} a_{\text{Б}} \beta_i \left[\int\limits_0^{r_0} r_i |R_{n_i,l_i}(\beta_i, r_i)|^2 dr_i + \frac{\mathcal{E}_0}{\epsilon_1} \int\limits_{r_0}^{\infty} r_i |R_{n_i,l_i}(\beta_i, r_i)|^2 dr_i \right], \tag{11}$$

$$\Delta_{n_e,l_e,m_e}^{n_h,l_h,m_h}(\beta_e, \beta_h) = -\sum_{l=0}^{\infty} \frac{4\Pi\mathcal{E}}{2l+1} \left[R_l(\beta_e, \beta_h)\right]_{n_e l_e}^{n_h l_h} (Y_{l0}^*)_{l_e m_e}^{l_h m_h} (Y_{l0})_{l_e m_e}^{l_h m_h}. \tag{12}$$

Тут $\epsilon = \dfrac{e^2}{\epsilon_0 a_{\text{Б}}}$, $a_{\text{Б}}$ — радіус Бора,

$$\left[R_l(\beta_e, \beta_h)\right]_{n_e l_e}^{n_h l_h} = \int\limits_0^{\infty} \int\limits_0^{\infty} r_e^2 r_h^2 a_{\text{Б}} |R_{n_e,l_e}(\beta_e, r_e)|^2 R_l(r_e, r_h) |R_{n_h,l_h}(\beta_h, r_h)|^2 dr_e dr_h \tag{13}$$

— радіяльні інтеґрали, що походять від функцій

$$R_l(r_e, r_h) = \begin{cases} \dfrac{1}{r_e} \left(\dfrac{r_e}{r_h}\right)^l, & r_e \le r_h, \\ \frac{1}{r_h} \left(\frac{r_h}{r_e}\right)^l, & r_h \le r_e. \end{cases} \tag{14}$$

Величини $(Y_{l0})_{l_i,m_i}^{l_i,m_i}$ є частковим випадком відомих [11] інтеґралів від сферичних функцій

$$(Y_{lm})_{l_2 m_2}^{l_1 m_1} = \int \int Y_{l_1 m_1}^* Y_{lm} Y_{l_2 m_2} d\Omega. \tag{15}$$

Мінімізація функціонала (10) за параметрами β_e, β_h приводить до системи рівнянь

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial \left(E_{n_e l_e}^{(\beta_e)} + \Delta_{n_e l_e}^{(\beta_e)} + \Delta_{n_e,l_e,m_e}^{n_h,l_h,m_h}(\beta_e, \beta_h) \right)}{\partial \beta_e} = 0 \\ \frac{\partial \left(E_{n_h l_h}^{(\beta_h)} + \Delta_{n_h l_h}^{(\beta_h)} + \Delta_{n_e,l_e,m_e}^{n_h,l_h,m_h}(\beta_e, \beta_h) \right)}{\partial \beta_h} = 0 \end{aligned}\right\}. \tag{16}$$

Їх розв'язок дає значення параметрів $\bar{\beta}_e, \bar{\beta}_h$, які при заданому наборі квантових чисел визначають абсолютний мінімум функціонала, а отже й енерґетичний спектр екситона

$$E_{n_e,l_e,m_e}^{n_h,l_h,m_h} = E_g + E_{n_e l_e}(\bar{\beta}_e) + E_{n_h l_h}(\bar{\beta}_h) + \Delta_{n_e l_e}(\bar{\beta}_e) + \Delta_{n_h l_h}(\bar{\beta}_h) + \Delta_{n_e,l_e,m_e}^{n_h,l_h,m_h}(\bar{\beta}_e, \bar{\beta}_h) \tag{17}$$

і набір його хвильових функцій

$$\Psi_{n_e,l_e,m_e}^{n_h,l_h,m_h}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \Psi_{n_e,l_e,m_e}(\bar{\beta}_e, \mathbf{r}_e) \Psi_{n_h,l_h,m_h}(\bar{\beta}_h, \mathbf{r}_h). \tag{18}$$

Тепер потрібно знайти спектр енерґій E_{n_i,l_i} та явний вигляд радіяльних функцій R_{n_i,l_i}, тобто, по суті, розв'язати задачу Шрединґера для частинки, яка рухається в суперпозиції полів з кулонівським потенціялом і радіяльним прямокутним потенціялом, сили дії яких мають спільний центр. Подібну спрощену задачу у частковому випадку ($m_0 = m_1$, $\mathcal{E}_0 = \mathcal{E}_1$) і лише для зв'язаних станів розв'язано в праці [12], а загальний розв'язок задачі розглянемо в наступному параграфі.

III. СПЕКТР ТА ХВИЛЬОВІ ФУНКЦІЇ КВАЗІЧАСТИНКИ, ЯКА РУХАЄТЬСЯ В СУПЕРПОЗИЦІЇ КУЛОНІВСЬКОГО Й РАДІЯЛЬНОГО ПРЯМОКУТНОГО ПОТЕНЦІЯЛІВ

Розгляньмо квазічастинку з ефективною масою $m(r)$ і зарядом $-e$, яка рухається в середовищі сферичної квантової точки (радіуса r_0), у центрі якої є заряд e. Гамільтоніян має вигляд

$$H = -\nabla \frac{\hbar^2}{2m(r)} \nabla - \frac{e^2}{\mathcal{E}(r) r} + U(r), \tag{19}$$

де

$$\mathcal{E}(r) = \begin{cases} \mathcal{E}_0 \\ \mathcal{E}_1 \end{cases},$$

$$m(r) = \begin{cases} m_0 \\ m_1 \end{cases},$$

$$U(r) = \begin{cases} -V_0, & r < r_0, \\ 0, & r \geq r_0. \end{cases} \tag{20}$$

Оскільки гамільтоніян (19) центрально-симетричний, то розв'язок стаціонарного рівняння Шредингера доцільно шукати у такій сферичній системі координат:

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi), \tag{21}$$

внаслідок чого кутова частина відділяється, а для радіяльної хвильової функції отримуємо рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2m(r)}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r) - \frac{e^2}{\mathcal{E}r}R(r)$$
$$+U(r)R(r) = ER(r). \tag{22}$$

Аналітичний вигляд розв'язків цього рівняння залежить від ділянок енергій та радіуса r. З рис. 2 бачимо, що, вибравши початок відліку енергії так, щоб він збігався з верхом потенціяльного бар'єра, отримуємо чотири ділянки енергій: 1) $E < W_{\text{н}} = -\left(\frac{e^2}{\mathcal{E}_0 r_0} + V\right)$, 2) $W_{\text{н}} < E < W_{\text{в}} = -\frac{e^2}{\mathcal{E}_1 r_0}$, 3) $W_{\text{в}} < E < 0$, 4) $E > 0$ і дві ділянки зміни радіуса: а) $r < r_0$; б) $r > r_0$.

Функцію $R(r)$ доцільно шукати у вигляді

$$R(r) = \begin{cases} C_0 R_0, & r \leq r_0, \\ C_1 R_1, & r \geq r_0. \end{cases}. \tag{23}$$

Тоді, враховуючи умови неперервности хвильової функції та густини потоку ймовірности на межі середовищ

$$\left.\begin{aligned} &C_0 R_0(r_0) = C_1 R_1(r_1) \\ &C_0 \tfrac{1}{m_0\mathcal{E}_0} R_0'(r)\Big|_{r_0} = C_1 \frac{1}{m_1\mathcal{E}_1} R_1'(r)\Big|_{r_0} \end{aligned}\right\}, \tag{24}$$

у ділянці від'ємних енергій ($E < 0$) отримуємо дисперсійне рівняння, з якого визначаємо енергетичний спектр

$$m_1 \frac{\partial \ln R_0(r)}{\partial r}\Big|_{r_0} = m_0 \frac{\partial \ln R_1(r)}{\partial r}\Big|_{r_0}, \tag{25}$$

а з урахуванням умови нормування

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr = |C_0|^2 \int_0^{r_0} |R_0(r)|^2 r^2 dr$$
$$+ |C_1|^2 \int_{r_0}^\infty |R_1(r)|^2 r^2 dr = 1 \tag{26}$$

однозначно знаходимо коефіцієнти C_0, C_1, а отже і хвильові функції $R(r)$.

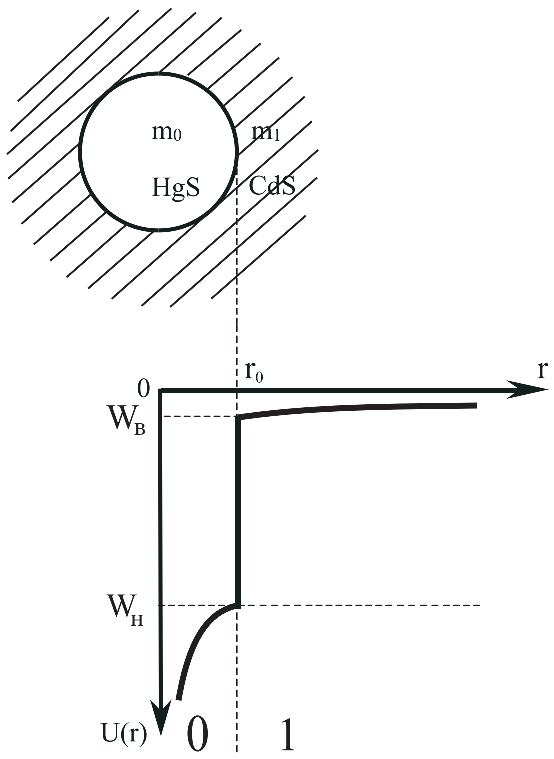

Рис. 2. Геометрична схема сферичної наносистеми та потенціял електрона в наносистемі.

У ділянці $E > 0$ умови (24) виконуються при довільних значеннях E, а умова нормування така:

$$\int R^*_{E'}(r) R_E(r) r^2 dr = \delta(E - E'). \tag{27}$$

Радіяльну функцію $R(r)$ для кожної ділянки будемо шукати, перейшовши до функції $\rho(r)$

$$R(r) = \frac{1}{r}\begin{cases} C_0\rho_0(r) \\ C_1\rho_1(r) \end{cases}. \tag{28}$$

Знайдемо розв'язки рівняння Шредингера для кожної з ділянок енергії в різних ділянках зміни радіуса.

1. Розгляньмо випадок $E < W_н = -\left(\frac{e^2}{\mathcal{E}_0 r_0} + V\right)$.

а) в ділянці (0) зміни r, де $r < r_0$, враховуючи, що $|E| > |V|$, та використавши (28), із (22) одержимо рівняння Уіттекера

$$\frac{\partial^2 \rho_0(r)}{\partial \xi_0^2} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{\chi_0^{\mathrm{I}}}{\xi_0} + \frac{1/4 - (l+1/2)^2}{\xi_0^2}\right)\rho_0(r) = 0, \tag{29}$$

де

$$\xi_0 = \alpha_0^{\mathrm{I}} r,$$
$$\alpha_0^{\mathrm{I}} = i\sqrt{\frac{8m_0(V+E)}{\hbar^2}},$$
$$\chi_0^{\mathrm{I}} = i\frac{e^2}{\mathcal{E}_0\hbar}\sqrt{\frac{m_0}{2(V+E)}}, \tag{30}$$

його розв'язком є функція Уіттекера

$$\rho_0(r) = \xi_0^{l+1} e^{-\xi_0/2}\Phi(l+1-\chi_0^{\mathrm{I}}, 2l+2, \xi_0). \tag{31}$$

$\Phi(a,b,x)$ — вироджена гіпергеометрична функція [13].

Використовуючи (28) та (30), одержимо радіяльну функцію $R_0^{\mathrm{I}}(r)$:

$$R_0^{\mathrm{I}}(r) = (\alpha_0^{\mathrm{I}})^{l+1} r^l e^{-\alpha_0^{\mathrm{I}} r/2}\Phi(l+1-\chi_0^{\mathrm{I}}, 2l+2, \alpha_0^{\mathrm{I}} r). \tag{32}$$

б) в ділянці (1) зміни r, де $r > r_0$, де $|E| > V = 0$, аналогічно до попереднього також одержимо рівняння Уіттекера

$$\frac{\partial^2 \rho_1(r)}{\partial \xi_1^2} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{\chi_1^{\mathrm{I}}}{\xi_1} + \frac{1/4 - (l+1/2)^2}{\xi_1^2}\right) \times \rho_1(r) = 0, \tag{33}$$

де

$$\xi_1 = \alpha_1^{\mathrm{I}} r, \quad \alpha_1^{\mathrm{I}} = i\sqrt{\frac{8m_1 E}{\hbar^2}}, \quad \chi_1^{\mathrm{I}} = i\frac{e^2}{\mathcal{E}_1\hbar}\sqrt{\frac{m_1}{2E}}, \tag{34}$$

Розв'язком рівняння (33) є функція Уіттекера

$$\rho_1(r) = \frac{\xi_1^{\chi_1^{\mathrm{I}}} e^{-\xi_1/2}}{\Gamma(l+1-\chi_1^{\mathrm{I}})}\int_0^\infty t^{l-\chi_1^{\mathrm{I}}} e^{-t}\left(1+\frac{t}{\xi_1}\right)^{l+\chi_1^{\mathrm{I}}} dt \tag{35}$$

Отже, з використанням (28) та (34) радіяльна функція $R_1^{\mathrm{I}}(r)$ матиме вигляд

$$R_1^{\mathrm{I}}(r) = \frac{(\alpha_1^{\mathrm{I}})^{\chi_1^{\mathrm{I}}} r^{\chi_1^{\mathrm{I}}-1} e^{-\alpha_1^{\mathrm{I}} r/2}}{\Gamma(l+1-\chi_1^{\mathrm{I}})} \times \int_0^\infty t^{l-\chi_1^{\mathrm{I}}} e^{-t}\left(1+\frac{t}{\alpha_1^{I} r}\right)^{l+\chi_1^{\mathrm{I}}} dt. \tag{36}$$

2. Розгляньмо випадок $W_н < E < W_в = -\frac{e^2}{\mathcal{E}_1 r_0}$.

а) при зміні r у межах ядра системи (ділянка 0, $r < r_0$).

Враховуючи, що $|E| < |V|$, та використовуючи (28), із (22) одержимо рівняння Кулона

$$\frac{\partial^2 \rho_0(r)}{\partial \xi_0^2} + \left(1 - \frac{2\chi_0^{\mathrm{II}}}{\xi_0} - \frac{l(l+1)}{\xi_0^2}\right)\rho_0(r) = 0, \tag{37}$$

де

$$\xi_0 = \alpha_0^{\mathrm{II}} r,$$
$$\alpha_0^{\mathrm{II}} = \sqrt{\frac{2m_0(V+E)}{\hbar^2}},$$
$$\chi_0^{\mathrm{II}} = -\frac{e^2}{\mathcal{E}_0\hbar}\sqrt{\frac{m_0}{2(V+E)}}, \tag{38}$$

розв'язком якого є функція Кулона

$$\rho_0(r) = \frac{2^l e^{-\Pi\chi_0^{\mathrm{II}}/2}\Gamma(l+1+i\chi_0^{\mathrm{II}})}{\Gamma(2l+2)} \times \xi_0^{l+1} e^{-i\xi_0}\Phi(l+1-i\chi_0^{\mathrm{II}}, 2l+2, 2i\xi_0), \tag{39}$$

а отже, використовуючи (28) та (38), одержимо радіяльну функцію

$$R_0^{\mathrm{II}}(r)R_0^{\mathrm{II}}(r) = \frac{2^l e^{-\Pi\chi_0^{\mathrm{II}}/2}\Gamma(l+1+i\chi_0^{\mathrm{II}})}{\Gamma(2l+2)} \times(\alpha_0^{\mathrm{II}})^{l+1} r^l e^{-i\alpha_0^{\mathrm{II}} r}\Phi(l+1-i\chi_0^{\mathrm{II}}, 2l+2, 2i\alpha_0^{\mathrm{II}} r); \tag{40}$$

б) при зміні r у межах навколишнього середовища (ділянка 1, $r > r_0$).

Ситуація повністю аналогічна до 1б), тому тут $\alpha_1^{\mathrm{II}} = \alpha_1^{\mathrm{I}}$ та $\chi_1^{\mathrm{II}} = \chi_1^{\mathrm{I}}$. Таким чином, радіяльна функція $R_1^{\mathrm{II}}(r)$ в цій ділянці матиме вигляд

$$R_1^{\mathrm{II}}(r) = \frac{(\alpha_1^{\mathrm{I}})^{\chi_1^{\mathrm{I}}} r^{\chi_1^{\mathrm{I}}-1} e^{-\alpha_1^{\mathrm{I}} r/2}}{\Gamma(l+1-\chi_1^{\mathrm{I}})} \times \int_0^\infty t^{l-\chi_1^{\mathrm{I}}} e^{-t}\left(1+\frac{t}{\alpha_1^{\mathrm{I}} r}\right)^{l+\chi_1^{\mathrm{I}}} dt. \tag{41}$$

3. Розгляньмо випадок $W_в < E < 0$.

а) коли r змінюється в межах ядра системи (ділянка 0, $r < r_0$).

Ситуація повністю аналогічна до 2а). Отже, $\alpha_0^{\mathrm{III}} = \alpha_0^{\mathrm{II}}$ та $\chi_0^{\mathrm{III}} = \chi_0^{\mathrm{II}}$. Тоді радіяльна хвильова функція для цієї ділянки буде такою:

$$R_0^{\mathrm{III}}(r) = \frac{2^l e^{-\Pi\chi_0^{\mathrm{II}}/2}\Gamma(l+1+i\chi_0^{\mathrm{II}})}{\Gamma(2l+2)}$$
$$\times(\alpha_0^{\mathrm{II}})^{l+1} r^l e^{-i\alpha_0^{\mathrm{II}}r}\Phi(l+1-i\chi_0^{\mathrm{II}}, 2l+2, 2i\alpha_0^{\mathrm{II}}r). \quad (42)$$

б) при зміні r у межах навколишнього середовища (ділянка 1, $r > r_0$) ситуація аналогічна до 1а), і оскільки $V = 0$, то вводячи

$$\alpha_1^{\mathrm{III}} = i\sqrt{\frac{8m_1E}{\hbar^2}}, \quad \chi_1^{\mathrm{III}} = i\frac{e^2}{\mathcal{E}_1\hbar}\sqrt{\frac{m_1}{2E}}. \quad (43)$$

Радіяльну функцію $R_1^{\mathrm{III}}(r)$ подаємо як інтеґральне зображення через функції Уіттекера:

$$R_1^{\mathrm{III}}(r) = \frac{(\alpha_1^{\mathrm{III}})^{\chi_1^{\mathrm{III}}} r^{\chi_1^{\mathrm{III}}-1} e^{-\alpha_1^{\mathrm{III}}r/2}}{\Gamma(l+1-\chi_1^{\mathrm{III}})}$$
$$\times\int_0^\infty t^{l-\chi_1^{\mathrm{III}}} e^{-t}\left(1+\frac{t}{\alpha_1^{\mathrm{III}}r}\right)^{l+\chi_1^{\mathrm{III}}} dt. \quad (44)$$

4. Нарешті в ділянці позитивних значень енерґії ($E > 0$), згідно з [11], отримаємо такий вираз для радіяльної хвильової функції:

$$R_{E_l}(r) = \frac{C_{0E_l}e}{\sqrt{2\hbar E}}\left(\frac{m_0}{E}\right)^{1/4}\frac{(4\hbar^{-1}\sqrt{2m_0E}r)^l}{2l+1}$$
$$\times F\left(\frac{ie^2}{2\hbar\mathcal{E}_0}\sqrt{\frac{m_0}{E}}, 2(l+1), 4i\hbar^{-1}\sqrt{m_0E}r\right)\Big|_{r\le r_0}$$
$$+\frac{C_{1E_l}e}{\sqrt{2\hbar E}}\left(\frac{m_1}{E}\right)^{1/4}\frac{(4\hbar^{-1}\sqrt{2m_1E}r)^l}{2l+1}$$
$$\times F\left(\frac{ie^2}{2\hbar\mathcal{E}_1}\sqrt{\frac{m_1}{E}}, 2(l+1), 4i\hbar^{-1}\sqrt{m_1E}r\right)\Big|_{r\ge r_0}. \quad (45)$$

Таким чином, задача про спектр і хвильові функції зарядженої квазічастинки (електрона чи дірки) у суперпозиції кулонівського й радіяльного поля з прямокутним потенціялом розв'язана точно, а отже модифікованим методом Бете в застосованому підході розв'язана задача і про спектр та хвильові функції екситона в КТ в середовищі.

Дослідження спектрів і хвильових функцій екситонів у квантових точках, що розташовані в масивних середовищах, для конкретних наногетеросистем будуть виконані в наступних роботах.

[1] A. di Carlo, Phys. Status Solidi B **1**, 5 (2001).

[2] D. Schooss, A. Mews, A. Eychmuller, H. Weller, Phys. Rev. Lett. **24**, 17072 (1994).

[3] М. В. Ткач, В. А. Головацький, О. М. Войцехівська, М. Я. Мінькова, Укр. фіз. журн. **5**, 617 (1998).

[4] М. В. Ткач, В. А. Головацький, О. М. Войцехівська, М. Я. Міхальова, Р. Б. Фартушинський, Журн. фіз. досл. **3**, 342 (2000).

[5] В. А. Головацький, Журн. фіз. досл. **4**, 583 (1998).

[6] M. Tkach, V. Holovatsky, O. Voitsekhivska, M. Mykhalyova, R. Fartushynsky, Phys. Status Solidi B **2**, 331 (2001).

[7] J. L. Marin, R. Riera, S. A. Cruz, J. Phys.: Condens Matter **10**, 331 (1998).

[8] M. Tkach, V. Holovatsky, O. Voitsekhivska, M. Mikhalyova, *Proceeding of the IX Intern. Conf. Institute of Physics, Humboldt University 189*, (2000).

[9] С. И. Покутний, Физ. тверд. тела **2**, 512 (1996).

[10] А. С. Давыдов, *Квантовая механика* (Физматгиз, Москва, 1963).

[11] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика* (Физматгиз, Москва, 1963).

[12] Chun-Ching Yang, Li-Chi Liu, Shih-Hsin Chang, Phys. Rev. B **4**, 1954 (1998).

[13] И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений* (Физматгиз, Москва, 1962).

BETHE'S METHOD IN THE THEORY OF ELECTRON LOCALIZED IN SPHERICAL QUANTUM DOTS EMBEDDED INTO MASSIVE MEDIUM

M. V. Tkach, Y. M. Berezovs'ky
Chernivtsi National University, Department of Theoretical Physics,
2 Kotsiubynsky Str., Chernivtsi, UA–58012, Ukraine
e-mail: theormyk@chnu.cv.ua

A general theory of exciton spectrum in spherical quantum dots embedded into the massive medium has been developed in the framework of Bethe's variational method which makes it possible to take into account not only discrete states but also states of the continuous spectrum.