

МІЖРІВНЕВІ ПЕРЕХОДИ У КВАНТОВІЙ ТОЧЦІ З АКЦЕПТОРНОЮ ДОМІШКОЮ

В. І. Бойчук, Р. Я. Лешко, І. В. Білинський, Л. М. Турянська

*Кафедра теоретичної фізики Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка,
вул. Стрийська, 3, Дрогобич, 82100, Україна*

(Отримано 14 листопада 2011 р.; в остаточному вигляді — 24 липня 2012 р.)

Визначено енергетичний спектр акцепторної домішки у квантовій точці в межах багатозонної теорії Латтінджера. Проаналізовано оптичні параметри квантової точки та встановлено правила відбору для міжрівневих переходів у дипольному наближенні. Отримано залежності матричного елемента дипольного моменту міжрівневих переходів та сили осцилятора для лінійно поляризованого світла від розміру квантової точки. Досліджено вплив домішки на оптичні параметри квантової точки. Показано, що врахування поляризаційних зарядів приводить до якісної та кількісної зміни енергетичного спектра дірки й до зміщення смуг поглинання у високоенергетичну область.

Ключові слова: акцепторна домішка, квантова точка, міжрівневі переходи, поляризаційні заряди.

PACS number(s): 71.55.-i, 73.21.La, 74.25.Gz

I. ВСТУП

Сучасні нанотехнології дають змогу створювати різні наноб'єкти та їх поєднання. Саме використання низькорозмірних гетероструктур уможливило отримувати поліпшені властивості оптоелектронних приладів. Зокрема, квантові точки (КТ) є дуже перспективними квазінульвимірними об'єктами, на основі яких можна конструювати високопродуктивні електронні й оптоелектронні прилади.

Останнім часом зростає зацікавленість внутрішньозонними оптичними переходами [1, 2]. Це зумовлено тим, що енергії цих переходів лежать у терагерцовому діапазоні, а джерела такого випромінювання дуже часто застосовують у різних галузях. Крім того, результати досліджень міжрівневих переходів можна використати для побудови детекторів зазначеного випромінювання.

Відомо, що КТ можна отримати досить високої якості, але це не гарантує на 100 % відсутності жодних дефектів. У КТ може бути домішка, хоча вона не бажана. З іншого боку, домішка може потрапити в систему внаслідок легування. Тому так чи інакше КТ може містити домішки, які впливатимуть на її фізичні властивості, зокрема й оптичні.

Оскільки центральною характеристикою наноб'єктів є одночастинкові стани, тому значна кількість теоретичних праць [3–10] присвячена їх дослідженню. У них для ліпшої збіжності результатів обчислень з експериментальними даними постійно ускладнювали теоретичні моделі. На сьогодні відомі точні розв'язки відповідних рівнянь моделі з центральною донорною домішкою з урахуванням і нехтуванням діелектричного розриву на гетеромежах [3–7]. Енергетичний спектр домішового електрона визначено в кубічній КТ варіаційним методом [11]. Загальні властивості домішок у сферичній КТ за наявності

зовнішнього електричного поля проаналізовано у [12] із використанням розкладу по плоских хвилях. Досліджено ефект Штарка. У [13] порівняно варіаційні методи та теорію збурень при визначенні енергії домішки. Показано, що в загальному випадку варіаційні методи дають ліпші результати. Еліпсоїдальну КТ з нецентральною водневоподібною домішкою та параболічним потенціалом розглянуто в [14]. Власні стани домішки визначено методом розкладу хвильової функції по точних функціях задачі з центральною домішкою. Результати для енергії зв'язку домішки подано як функції розташування домішки та параметра еліптичності. На основі таких досліджень одночастинкових станів обчислено коефіцієнт поглинання, пов'язаний із внутрішньозонними міжрівневими переходами, які стимульовані поляризованим світлом, при використанні компактного підходу матриці густини [1, 2].

У зв'язку з підвищеним інтересом до міжрівневих переходів появилася значна кількість теоретичних праць, у яких досліджено лінійний та нелінійний коефіцієнти поглинання світла, зумовлені міжрівневими переходами КТ з донорними домішками [15–18]. У цих працях аналізували як сферичні, так і еліпсоїдальні КТ, а домішку розглядали як у центрі КТ, так і поза ним. Потенціал обмеження задавали і параболічним [17], і за допомогою потенціалу Гаусса [16]. Використовували також і скінченний прямокутний потенціал [18].

Як видно з аналізу праць, значну увагу приділено КТ з донорними домішками, бо для їх опису можна використовувати одозонну модель зони провідності, що в підсумку приводить до хвильового рівняння Шредингера з ефективною масою. Для адекватного опису діркових станів КТ потрібно використовувати багатозонні моделі [9, 10], для яких у випадку акцепторних домішок точні розв'язки відповідних радіальних рівнянь поки-що невідомі. Також при знач-

ній зміні діелектричної проникності гетеросистеми до розгляду слід включити поляризаційні заряди, що виникають на гетеромежах, індукованих зарядженими квазічастинками та йоном домішки [8].

Зважаючи на зазначене, метою цієї роботи є дослідити міжрівневі оптичні переходи у сферичній КТ з акцепторною домішкою в її центрі в мажах моделі Латтінджера, визначити вплив поляризаційних зарядів на оптичні параметри КТ. Оскільки акцепторна домішка змінить спектр КТ, то в роботі порівняно спектри міжрівневого поглинання КТ з домішкою і без неї.

II. ТЕОРІЯ

Розглянуто сферичну КТ радіусом a , діелектричною проникністю ε_1 , поміщеною в матрицю з діелектричною проникністю ε_2 . У центрі КТ є акцепторна домішка. Нехай гетеросистема утворена кристалами зі слабкою спін-орбітальною взаємодією Δ та великою забороненою зоною E_g . У такому разі можна знехтувати зоною провідності та вважати, що $\Delta \rightarrow 0$. У теорії Латтінджера це еквівалентно нехтуванню спін-орбітальною взаємодією [19]. Нехтуючи гофрованість ізоенергетичних поверхонь в k -просторі (сферичне наближення) [20], гамільтоніан системи запишемо у вигляді:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2} (\gamma_1 + 4\gamma) \mathbf{p}^2 - 3\gamma (\mathbf{p}\mathbf{J})^2 + \Pi(r), \quad (1)$$

де \mathbf{J} – оператор спінового моменту $j = 1$, γ_1, γ – параметри Латтінджера. Потенціальна енергія $\Pi(r)$ є сумою:

$$\Pi(r) = U(r) + V(r) + V_p(r). \quad (2)$$

У цій статті розглянуто гетеросистему з великим розривом зон. Саме тому потенціальну енергію, що задає обмеження, вибрано у вигляді нескінченно глибокої сферично-симетричної потенціальної ями:

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a, \\ \infty, & r > a. \end{cases} \quad (3)$$

Взаємодію дірки з йоном домішки та поляризаційними зарядами, які цей йон індукує, запишемо так:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_1 r} - \frac{e^2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_1\varepsilon_2 a} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_1 r} - V^*(a). \quad (4)$$

Дірка також індукує поляризаційні заряди та взаємодіє з ними. Потенціальна енергія такої взаємодії (потенціал самодії) має вигляд [21–23]:

$$V_p(r) = \frac{e^2(\beta_1 - \beta_2)}{8\pi\varepsilon_0\varepsilon_1 a} \times \left[\frac{a^2}{a^2 - r^2} + \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} F\left(1, \beta_2; \beta_2 + 1; \left(\frac{r}{a}\right)^2\right) \right], \quad (5)$$

де $\beta_1 = \varepsilon_1/(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)$, $\beta_2 = \varepsilon_2/(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)$, $F(a; b; c; x)$ – узагальнена гіпергеометрична функція [24].

Хвильову функцію, що є розв'язком рівняння Шредингера з гамільтоніаном (1) у сферично-симетричному полі, виражено добутком власних функцій оператора повного моменту імпульсу $\vec{\mathbf{F}} = \vec{\mathbf{F}} + \vec{\mathbf{J}}$ і радіальних функцій. У працях [20, 25] показано, що існують три типи станів:

$$\psi_{f,M}^{f-1,f+1}(\vec{r}) = R_f^{f-1}(r) \Phi_{f,M}^{f-1}(\theta, \varphi) + R_f^{f+1}(r) \Phi_{f,M}^{f+1}(\theta, \varphi), \quad (f \geq 1; l = f-1, f+1), \quad (6)$$

$$\psi_{f,M}^f(\vec{r}) = R_f^f(r) \Phi_{f,M}^f(\theta, \varphi), \quad (f \geq 1; l = f), \quad (7)$$

$$\psi_{0,0}^1(\vec{r}) = R_0^1(r) \Phi_{0,0}^1(\theta, \varphi), \quad (f = 0; l = 1). \quad (8)$$

Тут $\Phi_{f,M}^l(\theta, \varphi)$ – сферичні спінори, що відповідають спіну $j = 1$; $\hbar^2 l(l+1)$, $\hbar^2 f(f+1)$, $\hbar M$ – власні значення операторів \mathbf{L}^2 , \mathbf{F}^2 , \mathbf{F}_z відповідно.

Для трьох типів станів (6)–(8) відповідні радіальні рівняння матимуть вигляд:

$$\frac{\hbar^2 \gamma_1}{2} \begin{pmatrix} C_1 \mathbf{B}_{f-2}^+ \mathbf{B}_{f-1}^- & C_2 \mathbf{B}_f^- \mathbf{B}_{f+1}^- \\ C_2 \mathbf{B}_f^+ \mathbf{B}_{f-1}^+ & C_3 \mathbf{B}_{f+2}^- \mathbf{B}_{f+1}^+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_f^{f-1} \\ R_f^{f+1} \end{pmatrix} + \Pi(r) \begin{pmatrix} R_f^{f-1} \\ R_f^{f+1} \end{pmatrix} - E \begin{pmatrix} R_f^{f-1} \\ R_f^{f+1} \end{pmatrix} = 0, \quad (9)$$

$$-\frac{\hbar^2 \gamma_1}{2} (1 - \mu) (\Delta_f R_f^f) + \Pi(r) R_f^f - E R_f^f = 0, \quad (10)$$

$$-\frac{\hbar^2 \gamma_1}{2} (1 + 2\mu) (\Delta_1 R_0^1) + \Pi(r) R_0^1 - E R_0^1 = 0. \quad (11)$$

У рівняннях (9)–(11) використано такі позначення:

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

$$\mathbf{B}_l^+ = \frac{d}{dr} - \frac{l}{r}, \quad \mathbf{B}_l^- = \frac{d}{dr} + \frac{(l+1)}{r},$$

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

$$C_3 = 1 + \frac{f+2}{2f+1} \mu, \quad \mu = \frac{2\gamma}{\gamma_1}.$$

Радіальні рівняння першого типу станів (9) з потенціальною енергією (2) точних розв'язків не мають. У цій статті для його розв'язання використано варіаційний метод Рітца. Як показано в працях [10, 20, 25],

основний стан описується саме хвильовою функцією для першого типу станів, коли $f = 1$.

Якщо знехтувати потенціалом самодії $V_p(r)$ та вважати, що домішка відсутня ($V(r) = 0$), то радіальні рівняння (9) матимуть точні розв'язки, які подано за допомогою сферичних функцій Бесселя першого роду:

$$\begin{aligned} (R_f^{f-1}(r))_h &= D_1 j_{f-1} \left(\frac{\lambda r}{a} \right) + D_2 j_{f-1} \left(\frac{\lambda \beta r}{a} \right), \\ (R_f^{f+1}(r))_h &= -D_1 \sqrt{\frac{f}{f+1}} j_{f+1} \left(\frac{\lambda r}{a} \right) \\ &+ D_2 \sqrt{\frac{f+1}{f}} j_{f+1} \left(\frac{\lambda \beta r}{a} \right), \end{aligned} \quad (12)$$

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

Граничні умови для моделі з нескінченним розривом зон "вимагають", щоб хвильові функції на межі

КТ дорівнювали нуеві. З цих умов одержано дисперсійне рівняння:

$$\frac{f}{f+1} j_{f+1}(\lambda) j_{f-1}(\beta \lambda) + j_{f-1}(\lambda) j_{f+1}(\beta \lambda) = 0 \quad (13)$$

і знайдено енергетичний спектр дірки. Дисперсійне рівняння (13) залежить лише від двох параметрів: квантового числа f та параметра β , що визначається через параметр μ . Обчисливши $\lambda(\mu)$, одержимо аналітичний вираз для енергії дірки. Розв'язки дисперсійного рівняння позначено $\lambda_{f,n}$, де n задає номер кореня дисперсійного рівняння при фіксованому f .

Отже, енергію дірки для першого типу станів визначено за формулою:

$$E_{f,n} = \frac{\hbar^2 \gamma_1 (1 - \mu) \lambda_{f,n}^2(\mu)}{2 a^2}, \quad (14)$$

а з граничних умов виражено D_2 через D_1 . Тоді радіальні функції (12) запишемо у вигляді:

$$\begin{aligned} (R_f^{f-1}(r))_h &= D_1 \left[j_{f-1} \left(\frac{\lambda r}{a} \right) - \frac{j_{f-1}(\lambda)}{j_{f-1}(\lambda \beta)} j_{f-1} \left(\frac{\lambda \beta r}{a} \right) \right], \\ (R_f^{f+1}(r))_h &= D_1 \left[-\sqrt{\frac{f}{f+1}} j_{f+1} \left(\frac{\lambda r}{a} \right) - \frac{j_{f-1}(\lambda)}{j_{f-1}(\lambda \beta)} \sqrt{\frac{f+1}{f}} j_{f+1} \left(\frac{\lambda \beta r}{a} \right) \right]. \end{aligned} \quad (15)$$

Функції (15) використано при побудові варіаційної функції акцепторної домішки. Оскільки радіальні рівняння для першого типу станів записані в матричній формі, то доцільно варіаційну функцію вибрати й записати як вектор-стовпець:

$$\begin{pmatrix} R_f^{f-1} \\ R_f^{f+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A F(r) \\ B G(r) \end{pmatrix}, \quad (16)$$

де A, B — лінійні варіаційні параметри, а функції $F(r), G(r)$ вибрано у вигляді:

$$F(r) = e^{-\alpha r} (R_1^0(r))_h, \quad G(r) = e^{-\alpha r} (R_1^2(r))_h, \quad (17)$$

де α — варіаційний параметр. Тут також ураховано, що $f = 1$.

Хвильову функцію (16) підставлено в радіальні рівняння (9), записані структурно:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H}_{11} & \mathbf{H}_{12} \\ \mathbf{H}_{21} & \mathbf{H}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A F(r) \\ B G(r) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} A F(r) \\ B G(r) \end{pmatrix}. \quad (18)$$

Домноживши на відповідні ермітово спряжені функції, одержимо функціонал, виражений через три варіаційні параметри:

$$E(A, B, \alpha) = \frac{A^2 \mathbf{H}_{11}^{FF} + AB (\mathbf{H}_{12}^{FG} + \mathbf{H}_{21}^{GF}) + B^2 \mathbf{H}_{22}^{GG}}{A^2 S^{FF} + B^2 S^{GG}}, \quad (19)$$

де

$$\mathbf{H}_{ij}^{MN} = \langle M | \mathbf{H}_{ij} | N \rangle, \quad i, j = 1, 2 \quad M, N = F(r), G(r),$$

$$S^{FF} = \langle F(r) | F(r) \rangle, \quad G^{FF} = \langle G(r) | G(r) \rangle.$$

Функціонал (19) мінімізовано аналітично за лінійними параметрами A, B . Одержаний новий функціонал залежатиме лише від одного варіаційного параметра:

$$E(\alpha) = \frac{H_{22}^{GG} S^{FF} + H_{11}^{FF} S^{GG}}{2 S^{FF} S^{GG}} - \frac{\sqrt{(H_{12}^{FG} + H_{21}^{GF})^2 S^{FF} S^{GG} + (H_{11}^{FF} S^{GG} - H_{22}^{GG} S^{FF})^2}}{2 S^{FF} S^{GG}}. \quad (20)$$

Чисельно мінімізуючи функціонал (20), знайдемо енергію акцепторної домішки та варіаційні параметри.

Як показують обчислення, проведені в працях [10, 20, 25], першим збудженим станом є той, що належить до другого типу станів при $f = 1$, які описуються радіальним рівнянням (10). Якщо знехтувати потенціалом самодії (5), то це рівняння має точні розв'язки, виражені функціями Кулона та Віттекера. Однак для послідовності та однакової точності обчислень це рівняння було також розв'язано варіаційним методом Рітца. Варіаційну хвильову функцію вибрано у вигляді:

$$R_1^1(r) = D_3 (R_1^1(r))_h e^{-\delta r}, \quad (21)$$

де

$$(R_1^1(r))_h = j_1(\chi_1^{(1)} r/a)$$

— розв'язок рівняння (10) без урахування йона домішки, $\chi_1^{(1)}$ — перший нуль сферичної функції Бесселя першого роду першого порядку, δ — варіаційний параметр. Відповідно до методу Рітца одержано функціонал, мінімізація якого дала змогу знайти енергію першого збудженого стану та варіаційний параметр.

Хоча радіальні пробні функції (16) і (21) не ортогональні, але, згідно з варіаційним методом, повні хвильові функції відповідних станів є ортогональними,

внаслідок ортогональності спінорів, які є складниками хвильової функції частинки (6)–(8).

Визначивши енергію на хвильові функції основного та першого збудженого станів, у цій статті на їх основі проаналізовано міжрівневі переходи. Для цього спершу визначено правила відбору для оптичних дипольних переходів між різними типами станів (6)–(8). Установлено такі правила відбору:

- I \leftrightarrow I ($f - f' = \pm 1$; $M - M' = 0, \pm 1$; $f, f' \geq 1$);
- I \leftrightarrow II ($f - f' = 0$; $M - M' = 0, \pm 1$; $f, f' \geq 1$);
- I \leftrightarrow III ($f - f' = 1$; $M - M' = 0, \pm 1$; $f \geq 1, f' = 0$);
- II \leftrightarrow II ($f - f' = \pm 1$; $M - M' = 0, \pm 1$; $f, f' \geq 1$);
- II \leftrightarrow III;
- III \leftrightarrow III.

Отже, згідно з правилами відбору, переходи між основним станом (I-тип, $f = 1$) та першим збудженим (II-тип, $f = 1$) дозволені.

Розглянуто випадок, коли КТ опромінують лінійно поляризованим світлом уздовж осі z . Для дворівневої системи матричний елемент дипольного моменту міжрівневих переходів з основного стану в перший збуджений подано у вигляді:

$$\begin{aligned} d_{1,2;M_1,M_2} &= \langle 2 | ez | 1 \rangle = \int d\vec{r} (\psi_{1,M_1}^1(r, \theta, \varphi))^+ er \cos \theta \psi_{1,M_2}^{0,2}(r, \theta, \varphi) \\ &= e \int d\vec{r} (R_1^1(r) \Phi_{1,M_1}^1(\theta, \varphi))^+ r \cos \theta R_1^0(r) \Phi_{1,M_2}^0(\theta, \varphi) \\ &+ e \int d\vec{r} (R_1^1(r) \Phi_{1,M_1}^1(\theta, \varphi))^+ r \cos \theta R_1^2(r) \Phi_{1,M_2}^2(\theta, \varphi) = I_1 + I_2, \end{aligned} \quad (22)$$

де $R_1^0(r)$, $R_1^2(r)$ — функції (16), $R_1^1(r)$ — функція (21), а верхнім символом + позначено ермітово спряжену функцію, у яку входить спінор, що є трикомпонентним вектором. Силу осцилятора переходу виражено через дипольний момент та енергії домішки [28]:

$$\begin{aligned} f_{1,2} &= \frac{2m_0}{e^2 \hbar^2 \gamma_1} \frac{(E_2 - E_1)}{g_1} \\ &\times \sum_{M_1=-1}^1 \sum_{M_2=-1}^1 |d_{1,2;M_1,M_2}|^2, \end{aligned} \quad (23)$$

де g_1 — кратність виродження початкового стану за квантовим числом $M = -1, 0, 1$. Безпосередньо обчислення показали, що дипольний момент (22) відмінний від нуля лише при переходах між станами при $M_1 = -1, M_2 = -1$ та $M_1 = 1, M_2 = 1$. Тому сума у формулі (23) міститиме тільки два доданки.

На основі записаних формул обчислено енергетичний спектр та оптичні параметри КТ з акцепторною домішкою.

III. АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Однією з гетеросистем із КТ, що досить добре задовольняє запропоновану модель є Si/SiO₂. Оскільки реальний розрив валентної зони в цій гетеросистемі $U_0 = 4.3$ eV, а величина спін-орбітальної взаємодії $\Delta = 0.04$ eV, то модель нескінченно високого потенціалу та гамільтоніан (1) є прийнятними. Для конкретних обчислень використано такі параметри [26]: $\gamma_1 = 4.22$, $\gamma = 0.65$, $\varepsilon_1 = 11.7$, $\varepsilon_2 = 3.9$.

Результати обчислень залежності енергії дірки від радіуса КТ подано на рис. 1 як з урахуванням, так і при нехтуванні поляризаційними зарядами. З рисунка видно, що зростання розміру КТ понижує енергію системи та зменшує вплив поляризаційних зарядів. Для дуже великих значень a енергія прямує до відповідної енергії в масивному кристалі кремнію. Урахування потенціалів (4) і (5), одержаних на основі точних розв'язків рівняння Пуассона, спричиняє появу немонотонності (мінімуму) в залежності енергії

від розміру КТ в цій моделі (криві 1', 2'). Аналогічні якісні залежності одержано і в однозонній моделі для донорної домішки [7] та моделях 3×3 [10] і 4×4 [9] для акцепторної домішки. Причина наявності мінімумів полягає у зростанні ефективної глибини потенціальної ями, залежної від $V^*(a)$, та у збільшенні просторового обмеження. Перший фактор веде до зменшення енергії, а другий спричиняє її збільшення. Конкуренція цих чинників веде до появи мінімумів у залежності $E(a)$. З рис.1,а також чітко видно, що різниця енергій між першим збудженим та основним станом $E_{tr} = E_2 - E_1$ за наявності йона акцепторної домішки є більшою, ніж відповідна різниця без домішки. Останнє й змінюватиме оптичні властивості КТ.

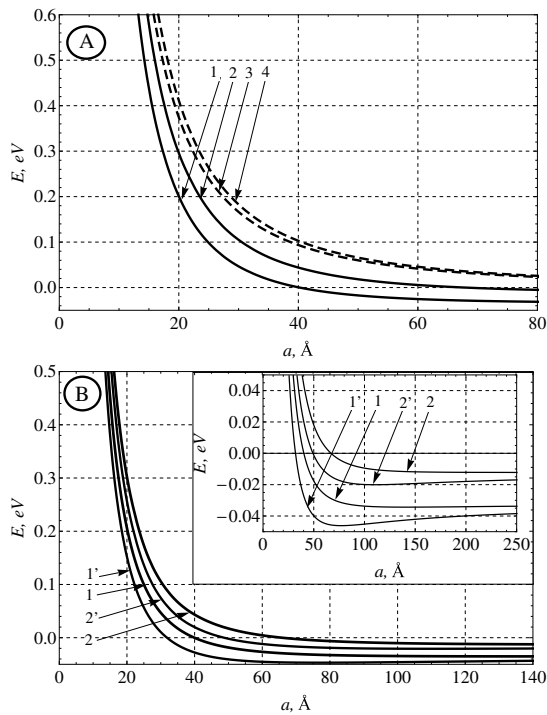


Рис. 1. Енергія дірки у сферичній КТ як за наявності йона акцепторної домішки (суцільні криві 1, 1', 2, 2'), так і при його відсутності (штрихові криві 3, 4). Кривими 1', 2' позначено енергії, що визначені з урахуванням поляризаційних зарядів.

У цій праці також встановлено, що при врахуванні внесків від поляризаційних зарядів смуги поглинання світла змістяться у високоенергетичну область. Це викликано збільшенням відстані між енергетичним рівнями.

Визначено, що наявність акцепторної домішки спричинить до зміщення міжрівневих смуг поглинання у високоенергетичну область на 30–40 meV. Також встановлено, що врахування поляризаційних зарядів впливає на розташування смуг поглинання. Наприклад, за наявності домішки, для $a = 80 \text{ \AA}$ різниця між розташуванням смуг поглинання ($\Delta E = E_{tr}^{\text{with polar.}} - E_{tr}^{\text{without polar.}}$) $\Delta E = 1.56 \text{ meV}$, для $a = 40 \text{ \AA}$ —

$\Delta E = 3.91 \text{ meV}$, а для $a = 20 \text{ \AA}$ — $\Delta E = 8.14 \text{ meV}$. Як і очікувалося, збільшення розмірів КТ зменшує зміщення смуг поглинання через послаблення впливу поляризаційних зарядів.

Крім зміни енергетичних властивостей КТ, наявність акцепторної домішки вплине на інші параметри. Зокрема, використавши точні розв'язки для дірки та варіаційні функції для акцепторної домішки, обчислимо залежності квадрата матричного елемента дипольного моменту міжрівневих переходів для лінійно поляризованого світла, яким опромінують КТ вздовж осі z , враховуючи та нехтуючи поляризаційними зарядами. Як було зазначено вище, $d_{1,2;M_1,M_2}$ відмінний від нуля лише при $M_1 = -1, M_2 = -1$ та $M_1 = 1, M_2 = 1$. Конкретне значення $d_{1,2;M_1,M_2}$ для цих двох випадків за абсолютною величиною однако-ве, тому надалі проаналізуємо квадрат модуля дипольного моменту, не вказуючи M .

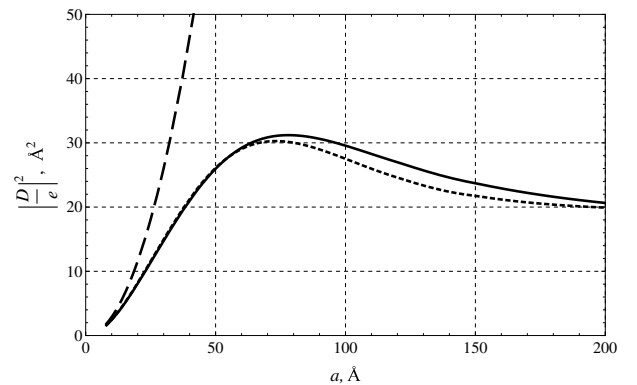


Рис. 2. Квадрат матричного елемента дипольного моменту міжрівневих переходів як функція радіуса КТ за наявності йона акцептора (суцільна та пунктирна) та за його відсутності (штрихова). Суцільна крива з урахуванням поляризаційних зарядів, пунктирна — без.

З рис. 2 видно, що для дірки без йона домішки дипольний момент монотонно зростає. Це пояснюється тим, що інтеграл перекриття хвильових функцій цих двох станів практично не залежить від розмірів КТ, а $|d_{1,2}/e|^2 \sim z$, тому збільшення розміру КТ спричиняє постійне зростання квадрата дипольного моменту міжрівневих переходів.

Деяко інша ситуація є у випадку наявності йона домішки. Зі збільшенням радіуса КТ спостерігаємо лінійне зростання $|d_{1,2}/e|^2$, якщо $a \in (20, 50) \text{ \AA}$. У цій області вплив поляризаційних зарядів на $|d_{1,2}/e|^2$ несуттєвий. Подальше збільшення радіуса КТ веде до немонотонної зміни матричного елемента. Також у цій області починає проявлятися вплив поляризаційних зарядів на дипольний міжрівневий перехід. Для гранично великих радіусів КТ обидві криві наближаються одна до одної внаслідок нескінченно малого впливу гетеромержі, на якій існують індуковані поляризаційні заряди, величина яких різко зменшується. Причиною немонотонної залежності дипольного моменту міжрівневих переходів є різні знаки інтегралів I_1 та I_2 (22). Зі збільшенням радіуса КТ I_1 зростає

за абсолютною величиною швидше, ніж I_2 , і швидше виходить на насичення. Крім цього, абсолютна величина I_1 є більшою, ніж I_2 . Зважаючи на те, що ці інтеграли різних знаків, то їхня конкуренція і приводить до появи немонотонності в залежності $|d_{1,2}/e|^2$, що чітко видно на рис. 2.

Хоча вплив поляризаційних зарядів на $|d_{1,2}/e|^2$ в області малих a незначний, однак енергії за умови врахування і нехтування поляризаційних зарядів вагомо відрізняються. Тому для зображення загальної картини на рис. 3 подано залежність сили осцилятора переходу від радіуса КТ.

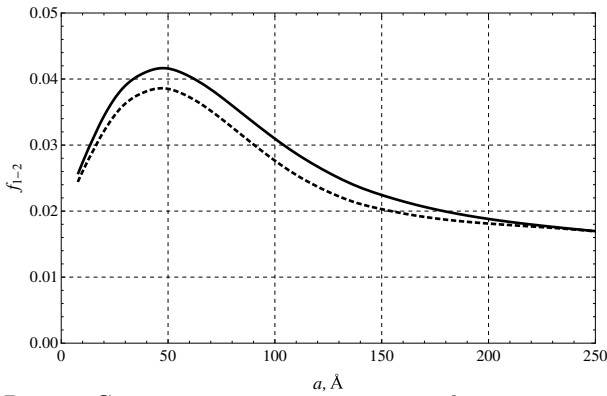


Рис. 3. Сила осцилятора переходу як функція радіуса КТ за наявності йона акцепторної домішки. Суцільна крива з урахуванням поляризаційних зарядів, пунктирна — без.

Як видно з рис. 3 урахування поляризаційних зарядів спричиняє зростання $f_{1,2}$ за наявності йона домішки для всіх радіусів КТ. Останнє зумовить зростання коефіцієнта поглинання світла. Сила осцилятора переходу за відсутності домішки не залежить від радіуса КТ і становить $f_{1,2} = 0.363032$.

Визначивши дипольний момент міжрівневих переходів та силу осцилятора, обчислюємо коефіцієнт поглинання світла [1, 2]:

$$\alpha(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0 \varepsilon}} \frac{\sigma \left(|d_{1,2;-1,-1}|^2 + |d_{1,2;1,1}|^2 \right) \hbar \Gamma_{1,2}}{g_1 \left((E_2 - E_1 - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{1,2})^2 \right)}, \quad (24)$$

де ω — частота падаючої хвилі, ε_0 — електрична стала, μ_0 — магнітна стала, ε — діелектрична проникність КТ, $\hbar\Gamma_{1,2}$ — енергія релаксації, що зумовлена електрон-фононою взаємодією та іншими факторами розсіювання. Густина зарядів у КТ σ вибрано на основі припущення, що КТ містить лише один заряд (дірку акцепторної домішки) $\sigma = 3/(4\pi a^3)$. Залежність коефіцієнта поглинання світла від енергії падаючого кванта показано на рис. 4

Як було зазначено вище, величина $\hbar\Gamma$ залежить від різних факторів розсіювання. Для її дослідження необхідно врахувати електрон-фонону взаємодію. Крім того, слід узяти до уваги те, що в реальних ситуаціях КТ досліджують при різних температурах. Відомо,

що величина $\hbar\Gamma$ може приймати різні значення в межах 1–10 meV [1, 2, 12–18, 27]. Аналіз формули (24) показав, що зменшення $\hbar\Gamma$ веде до зростання коефіцієнта поглинання (висоти піків поглинання). У граничному випадку, коли $\hbar\Gamma \rightarrow 0$, смуги перейдуть у δ -подібні лінії поглинання. Для зручності надалі вважаємо, що $\hbar\Gamma = 1$ meV.

Із формули (24) видно, що висота піка смуги поглинання, крім $\hbar\Gamma$, вагомо залежатиме й від концентрації носіїв σ у КТ. Згідно з нашим припущенням, що КТ містить лише одну частинку — дірку акцепторної домішки, σ є обернено пропорційною кубові радіуса КТ. Таким чином, висота смуг поглинання буде також приблизно обернено пропорційною кубові радіуса КТ. Такі міркування чинні за умови, що гетеросистема перебуває при низьких температурах. Крім вище вказаних величин, висота смуг поглинання також залежить і від дипольного моменту міжрівневих переходів. Розташування смуг поглинання (рис. 4) однозначно визначається лише положенням енергетичних рівнів у КТ, що, своєю чергою, залежать від її розмірів. Оскільки енергія міжрівневого переходу для дірки без акцепторної домішки є меншою, то смуги поглинання з йоном домішки зміщені у високоенергетичну область (суцільні та пунктирні криві; рис.4). Через це і при однакових розмірах КТ висота смуг поглинання без домішки є меншою від висоти смуг поглинання з йоном домішки. Другою причиною зміни висоти смуг поглинання є величина дипольного моменту, яка для малих радіусів у двох випадках (з домішкою і без) набирає близькі значення (рис. 2). Тому визначальною для висоти смуг поглинання в діапазоні малих радіусів є енергія E_{tr} . Урахування поляризаційних зарядів також змістить смуги поглинання у високоенергетичну область. Це викликано збільшенням відстані між енергетичними рівнями.

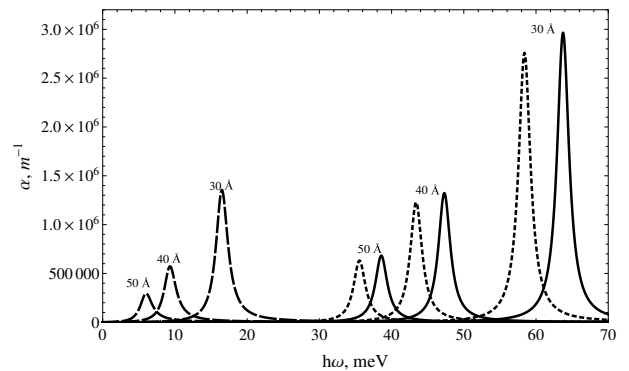


Рис. 4. Коефіцієнт поглинання світла за наявності йона акцептора (суцільні та пунктирні криві) та без нього — штрихові. Суцільна крива з урахуванням поляризаційних зарядів, пунктирна — без.

Отже, у цій статті обчислено міжрівневі оптичні переходи у сферичній КТ за наявності акцепторної домішки в її центрі та за її відсутності з урахуванням і нехтуванням внесків від поляризаційних зарядів на гетеромежах. Одержані результати дали змогу встановити:

- наявність немонотонної залежності енергії домішки від розмірів КТ, що пояснюється впливом поляризаційних зарядів;
- правила відбору для оптичних дипольних переходів дірки;
- що наявність йона домішки веде до зміщення смуг міжрівневого поглинання у високоенергетичну область;
- що врахування внесків від поляризаційних зарядів зміщує смуги поглинання у високоенергетичну область на декілька meV та спричиняє незначне зростання сили осцилятора міжрівневого переходу.

-
- [1] G. Rezaei, M. R. K. Vahdani, M. Barati, J. Nanoelectron. Optoelectron. **3**, 159 (2008).
- [2] M. R. K. Vahdani, G. Rezaei, Phys. Lett. A **373**, 3079 (2009).
- [3] Jia-Zin Zhu, Phys. Rev. B **41**, 6001 (1990).
- [4] Jia-Zin Zhu, Phys. Rev. B **50**, 4497 (1994).
- [5] Chun-Ching Yang, Li-Chi Liu, Shih-Hsin Chang, Phys. Rev. B **58**, 1954 (1998).
- [6] М. В. Ткач, В. А. Головацький, Я. М. Березовський, Фіз. хім. тверд. тіла **4**, 213 (2003).
- [7] V. I. Boichuk, I. V. Bilynskiy, R. Ya. Leshko, Ukr. J. Phys. **53**, 0991 (2008).
- [8] V. I. Boichuk, I. V. Bilynskiy, R. Ya. Leshko, Cond. Matt. Phys. **11**, 653 (2008).
- [9] V. I. Boichuk, I. V. Bilynskiy, R. Ya. Leshko, I. O. Shakleina, Ukr. J. Phys. **55**, 326 (2010).
- [10] V. I. Boichuk, I. V. Bilynskiy, R. Ya. Leshko, Cond. Matt. Phys. **13**, 13702(1) (2010).
- [11] Shu-Shen Li, Jian-Bai Xia, Phys. Lett. A **366**, 120 (2007).
- [12] D. Nasri, N. Sekkal, Physica E **42**, 2257 (2010).
- [13] I. F. I. Mikhail, I. M. M. Ismail, Superlatt. Microstruct. **48**, 388 (2010).
- [14] E. Sadeghi, A. Avazpour, Physica B **406**, 241 (2011).
- [15] Y. Yakar, B. Cakir, A. Ozmen, Opt. Commun. **283**, 1795 (2010).
- [16] Wenfang Xie, Superlatt. Microstruct. **48**, 239 (2010).
- [17] Wenfang Xie, Physica B **405** (2010), 3436.
- [18] G. Rezaei, M. R. K. Vahdani, B. Vaseghi, Curr. Appl. Phys. **11**, 176 (2011).
- [19] J. M. Luttinger, W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).
- [20] A. Baldereschi, N. O. Lipari, Phys. Rev. B **8**, 2697 (1973).
- [21] В. І. Бойчук, Р. Ю. Кубай, І. В. Білінський, Журн. фіз. досл. **3**, 187 (1999).
- [22] В. І. Бойчук, Р. Ю. Кубай, Фіз. тверд. тела **43**, 226(2001).
- [23] В. І. Бойчук, Р. Ю. Кубай, Г. М. Годованець, І. С. Шевчук, Журн. фіз. досл. **10**, 220 (2006).
- [24] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of mathematical function with formulas, graphs, and mathematical tables*, (Natl. Bur. Stand. Appl. Math. Series No. 55, Washington, D. C., 1964).
- [25] A. S. Moskalenko *et al.*, Phys. Rev. B **76**, 085427 (2007).
- [26] A. Dargys, J. Kundrotas, *Handbook on Physical Properties of Ge, Si, GaAs and InP* (Science and Encyclopedia Publishers, Vilnius, 1994).
- [27] A. Özmen *et al.*, Opt. Commun. **282**, 3999 (2009).
- [28] А. Ф. Полупанов, В. И. Галиев, М. Г. Новак, Фіз. тверд. тела **31**, 1375 (1997).

INTERLEVEL TRANSITIONS IN A QUANTUM DOT WITH AN ACCEPTOR IMPURITY

V. I. Boichuk, R. Ya. Leshko, I. V. Bilynskiy, L. M. Turyanska
Department of Theoretical Physics, Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University,
3, Stryiska St., Drohobych, UA- 82100, Ukraine
e-mail: leshkoroman@mail.ru

An acceptor's impurity energy spectra in the quantum dot were defined by the use the multiband Luttinger theory. Optical parameters of the quantum dot were analyzed and selection rules of the optical dipole transitions were derived. The dependence of the matrix element square of dipole momentum of the interlevel transition and the oscillator strength were obtained as a function of the quantum dot size. The effect of impurity on optical properties has been studied. It is shown that taking into account the polarization charges causes qualitative and quantitative changes of energy spectra and a shift of absorption bands into the high energy region.