

ВПЛИВ СУСІДНЬОГО ДОМІШКОВОГО ЙОНА НА МІЖРІВНЕВЕ АКЦЕПТОРНЕ ПОГЛИНАННЯ СВІТЛА НАНОКРИСТАЛАМИ CdSe

В. І. Бойчук, Р. Я. Лешко, В. Б. Гольський, Д. С. Карпін
*Кафедра теоретичної і прикладної фізики та комп'ютерного моделювання
Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка,
вул. Стрийська, 3, Дрогобич, Львівська обл., 82100, Україна
(Отримано 21 березня 2016 р.)*

У межах сферичного наближення багатозонної моделі Латтінджера обчислено енергетичний спектр дірки за наявності двох йонів акцепторної домішки у сферичному нанокристалі. Досліджено залежність енергетичних рівнів дірки від розташування домішок у наносистемі. Проаналізовано вплив положення домішок на оптичні параметри міжрівневих переходів. Визначено коефіцієнт поглинання світла, що зумовлений міжрівневими переходами дірки.

Ключові слова: дакцепторна домішка, квантова точка, міжрівневі переходи.

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

І. ВСТУП

На сьогодні нанорозмірні гетероструктури поряд із масивними кристалами стали основою сучасної електроніки. Розвиток наноелектроніки забезпечується дослідженнями та відкриттями нових властивостей наноплівки, квантових дрітків та квантових точок (КТ) [1, 3]. Властивості зазначених низькорозмірних систем вагомо залежать від різних дефектів, зокрема домішок.

За останні 20 років опубліковано значну кількість теоретичних праць, що стосуються мілких домішкових станів у КТ [4–18]. Зокрема, розглянуто донорні [4, 6–9, 12–21] й акцепторні домішки [5, 10, 11] у КТ сферичної [4–15], кубічної [16], еліпсоїдальної [18, 19], лінзоподібної [17] та іншої форм. Також в окремих працях враховувано вплив поляризаційних зарядів [7, 8, 10, 11, 14], які індукуються на поверхні гетероструктури йоном домішки та квазічастинкою.

Аналіз названих праць показав, що електронні стани більшості напівпровідникових КТ можна описати на основі моделі простого параболічного закону дисперсії з уведенням ефективних мас. Для центральних домішок без урахування поляризаційних зарядів рівняння Шредингера має точні розв'язки для огинаючих. Для акцепторних домішок потрібно врахувати складну структуру валентної зони. У працях [5, 10, 11, 22, 23] на основі багатозонної моделі Латтінджера [24] з використанням сферичного наближення [25] обчислено енергетичний спектр дірки акцепторної домішки. Розглянуто випадки сильної, слабкої та проміжної спин-орбітальної взаємодії.

Легування масивних кристалів та гетеросистем з КТ широко використовують для поліпшення радіаційної стійкості детекторів радіоактивного випромінювання. Причиною цього є заміщення дефектів вакансійного типу легуючими атомами. Зрозуміло, що при сильному легуванні гетеросистеми КТ може містити домішки. Важливим випадком є наявність акцепторних домішок усередині КТ. Використання таких наносистем як детекторів радіоактивного випромінювання може привести до утворення заряджених йонів домішок, які впливатимуть на детекторні влас-

тності [26]. На сьогодні є мало робіт, де теоретично досліджено властивості КТ з кількома домішками. Однією з них є стаття [27], де обчислено енергетичний спектр електрона в полі двох йонів донорних домішок у сферичній КТ. Наскільки нам відомо, не має аналогічної роботи, де досліджено дірковий спектр у КТ з двома йонами акцепторних домішок у межах сферичного наближення моделі Латтінджера. Тому поставлена задача є актуальною.

Також треба зауважити, що до основних фізичних принципів сучасної оптоелектроніки, що базуються на нанорозмірних об'єктах, належить міжзонне (високоенергетичне) поглинання електромагнітного випромінювання (зокрема випромінювання оптичного діапазону) та внутрішньозонне міжрівневе (низькоенергетичне) поглинання. Саме енергії останнього поглинання є в терагерцовому діапазоні. Тому міжрівневі переходи лежать в основі створення джерел терагерцового випромінювання [28]. А джерела такого випромінювання використовують у медицині в ТГц-томографах [29] для отримання зображень мікроскопічних об'єктів високої роздільної здатності [30]. Розглядається можливість розробки високошвидкісних ТГц-систем зв'язку [31]. Відповідно до вказаних можливостей та перспектив виявилось багато теоретичних праць, де досліджено міжрівневі переходи в КТ з донорними [12–21] та акцепторними [11] домішками з використанням компактного підходу матриці густини [16–18]. Аналізуючи ці праці, бачимо, що важливо також визначити оптичні параметри КТ з акцепторними домішками.

Отож, метою поданої статті є:

- визначення енергетичного спектра дірки в КТ з двома йонами акцепторної домішки в межах багатозонної моделі Латтінджера;
- визначення оптичних параметрів КТ з домішками, що зумовлені міжрівневими переходами;
- порівняння одержаних результатів з відповідними результатами для однієї акцепторної домішки.

II. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ ТА ЇЇ РОЗВ'ЯЗАННЯ

Розглянуто сферичну КТ радіусом a , у якій є два діаметрально розташовані негативно заряджені йони акцепторних домішок на відстанях D_1 і D_2 від центра КТ кожен. Нехай валентна зона гетероструктури чотирикратно вироджена в точці $k = 0$, бо гетероструктура утворена кристалами з великою забороненою зоною та сильною спін-орбітальною взаємодією, коли можна знехтувати зоною провідності та спін-відщепленою зоною. Вісь відліку енергії у валентній зоні направлено “вниз”. Тоді сферичний гамільтоніан Латтінджера без урахування зони провідності та спін-відщепленої зони матиме вигляд [32]:

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

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

$$\Pi(\mathbf{r}) = W(\mathbf{r}) + U(r), \quad (2)$$

Взаємодію дірки з йоном акцепторної домішки подано у вигляді кулонівської взаємодії двох точкових зарядів:

$$W(\mathbf{r}) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon|\mathbf{r} - \mathbf{D}_1|} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon|\mathbf{r} - \mathbf{D}_2|}, \quad (3)$$

де ϵ_0 — електрична стала, ϵ — діелектрична проникність КТ, $\mathbf{D}_1 = (0, 0, D_1)$, $\mathbf{D}_2 = (0, 0, -D_2)$, Z — валентність акцептора. У цій статті розглянуто гетеросистему з великим розривом зон. Тому потенціальну енергію, що задає потенціал обмеження для дірки, вибрано у вигляді нескінченно глибокої сферично-симетричної потенціальної ями:

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r < a, \\ \infty, & r \geq a. \end{cases} \quad (4)$$

Точні розв'язки рівняння Шредингера з гамільтоніаном (1) знайти не можна. Рівняння Шредингера можна аналітично розв'язати з гамільтоніаном \mathbf{H}_0 . Загальний вигляд хвильових функцій наступний [32]:

$$\psi_{f,M}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{2f+1} \sum_{l=f-j}^{f+j} (-1)^{l-j+M} R_f^l(r) \sum_{m_l} \sum_{m_j} \begin{pmatrix} l & j & f \\ m_l & m_j & -M \end{pmatrix} Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi_{m_j} \quad (5)$$

$\hbar^2 f(f+1)$, $\hbar^2 l(l+1)$, $\hbar^2 M$, $\hbar^2 m$, $\hbar^2 m_j$ є власними значеннями операторів \mathbf{F}^2 , \mathbf{L}^2 , \mathbf{F}_z^2 , \mathbf{L}_z^2 , \mathbf{J}_z^2 відповідно, χ_{m_j} — чотириккомпонентні спінові функції, $Y_{l,m}$ — сферичні гармоніки, які є власними функціями оператора \mathbf{L}^2 , $\begin{pmatrix} l & j & f \\ m_l & m_j & -M \end{pmatrix}$ — $3j$ -символи. На основі загальної функції (5) у роботах [22, 23] для сферично-симетричного поля отримано розв'язки трьох типів станів:

$$\begin{cases} \psi_{f,M}^{\text{I}} = R_f^{f-3/2}(r) \Phi_{f,M}^{f-3/2}(\theta, \varphi) + R_f^{f+1/2}(r) \Phi_{f,M}^{f+1/2}(\theta, \varphi), & f \geq 3/2, (l = f - 3/2, f + 1/2), \\ \psi_{f,M}^{\text{II}} = R_f^{f-1/2}(r) \Phi_{f,M}^{f-1/2}(\theta, \varphi) + R_f^{f+3/2}(r) \Phi_{f,M}^{f+3/2}(\theta, \varphi), & f \geq 3/2, (l = f - 1/2, f + 3/2), \\ \psi_{f,M}^{\text{III}} = R_{1/2}^l(r) \Phi_{1/2,M}^l(\theta, \varphi), & f = 1/2, (l = 1, 2), \end{cases} \quad (6)$$

де $\Phi_{f,M}^l(\theta, \varphi)$ — чотириккомпонентні спінори, що відповідають спіну $j = 3/2$. Для зручності обчислень перейдено до системи одиниць, де енергію вимірюють в одиницях ефективної енергії Рідберга ($Ry^* = 13.6\epsilon^2\gamma_1$ eВ), а відстані — в одиницях ефективного радіуса Бора ($a_b^* = 0.53\epsilon_1\gamma_1$ Å). У цій системі одиниць радіальні хвильові функції мають вигляд:

$$\begin{pmatrix} R_{i_2}^i \\ R_{i_1}^i \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} \frac{-C_2}{1+C_1-(1+\mu)} j_l \left(\chi \sqrt{(1-\mu)} \frac{r}{a} \right) \\ j_{l+2} \left(\chi \sqrt{(1-\mu)} \frac{r}{a} \right) \end{pmatrix} + A_2 \begin{pmatrix} \frac{-C_2}{1+C_1-(1-\mu)} j_l \left(\chi \sqrt{(1+\mu)} \frac{r}{a} \right) \\ j_{l+2} \left(\chi \sqrt{(1+\mu)} \frac{r}{a} \right) \end{pmatrix}, \quad (7)$$

де $i = \text{I, II}$, (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, а коефіцієнти в цьому виразі подано за допомогою $6j$ символів:

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

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

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

Для третього типу станів розв'язок можна подати за допомогою однієї сферичної функції Бесселя. На основі граничних умов для моделі з нескінченним розривом зон одержано дисперсійне рівняння, з якого знайдено параметр $\chi_{f,l,n}$, де n — номер розв'язку дисперсійного рівняння за фіксованих інших квантових числах. Звідси знайдено енергію дірки у сферичній КТ:

$$E_{f,l,n}^{(0)} = \left(\frac{\chi_{f,l,n}}{a} \right)^2 (1 - \mu^2). \quad (8)$$

Оскільки енергія дірки залежить ще від двох квантових чисел, то функції (6) можна перепозначити: $\psi_{f,M}^I = \psi_{f,M;n,l}^I$; $\psi_{f,M}^{II} = \psi_{f,M;n,l}^{II}$; $\psi_{f,M}^{III} = \psi_{f,M;n,l}^{III}$.

Щоб розв'язати рівняння Шредингера з гамільтоніаном (1), невідому хвильову функцію можна розкласти по повній системі функцій (5):

$$\Psi = \sum_i c_i \psi_i^0, \quad (9)$$

де ψ_i^0 — хвильова функція дірки у КТ без домішки. Індексом i позначено весь набір квантових чисел, що характеризують стан дірки. Підстановкою (9) у рівняння Шредингера з гамільтоніаном (1), домножуванням на ермітово спряжену функцію $(\psi_j^0)^+$ одержано лінійну однорідну систему рівнянь відносно коефіцієнтів розкладу:

$$\sum_i ((E_i^0 - E) \delta_{ji} + W_{ji}) c_i = 0, \quad (10)$$

де $W_{j,i}$ — матричний елемент потенціальної енергії (3) на функціях задачі без домішки. Із цієї системи рівнянь на умови нормування $\sum_i |c_i|^2 = 1$ знайдено енергетичний спектр акцепторної домішки та коефіцієнти розкладу, а отже і хвильову функцію. Точність значень енергії та вигляд хвильових функцій залежить від кількості доданків у сумі (9) та порядку визначника (10). Через те було використано процедуру знаходження розв'язків визначника (10) кількома етапами, послідовно збільшуючи його порядок. Результати кожного наступного етапу порівнювали з попередніми. Збільшення порядку визначника припиняли за

умови, що похибка в енергії становить менше 1%. Отже, для радіуса КТ 25 Å результати виходили на необхідну точність, якщо обчислювали з визначником 68x68, коли квантові числа $f \leq 7/2$, $l \leq 2$, $n \leq 4$, $-f \leq M \leq f$.

III. АНАЛІЗ ЕНЕРГЕТИЧНОГО СПЕКТРУ ДІРКИ КТ З ДВОМА ЙОНАМИ АКЦЕПТОРНИХ ДОМІШОК

Конкретні обчислення проведено гетеросистеми CdSe/діелетрик. При цьому використано такі параметри: $E_g = 1.841$ eV, $\Delta = 0.420$ eV, $\gamma_1 = 1.66$, $\gamma = 0.41$, $\varepsilon = 9.53$, $Z = 1$ [33–35]. Якщо ж в обчисленнях відкинути останній доданок з (3), то можна отримати результати, що опубліковані у статті [11]. Бачимо, що віддалення домішок від центра КТ спричинює розщеплення вироджених за магнітним квантовим числом енергетичних рівнів. 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 для центральної домішки, розщепиться на два. Схожі розщеплення енергетичних рівнів отримано для донорної домішки [14]. Однак у зв'язку з тим, що основний стан донорної домішки не вироджений в однозонній моделі, то відповідно розщеплення основного стану не відбувалося, на відміну від акцепторної домішки. Ця особливість відрізняє спектр акцепторної домішки в межах запропонованої моделі від спектра донорної домішки в межах простої параболічної зони.

На рис. 1 подано графік залежності енергії основного та збуджених станів дірки у КТ з одним йоном акцепторної домішки від відстані домішки до центра КТ.

Із рис. 1 видно, що основний енергетичний рівень домішки під час її зміщення від центра КТ розщеплюється на два вироджені рівні з $|M| = 3/2$ (крива 1) і з $|M| = 1/2$ (крива 2). Причину такої залежності від $|M|$ пояснюємо порушенням сферичної симетрії задачі та збереженням циліндричної симетрії. Збуджений

стан також розщеплюється — $|M| = 3/2$ (крива 3) і з $|M| = 1/2$ (крива 4).

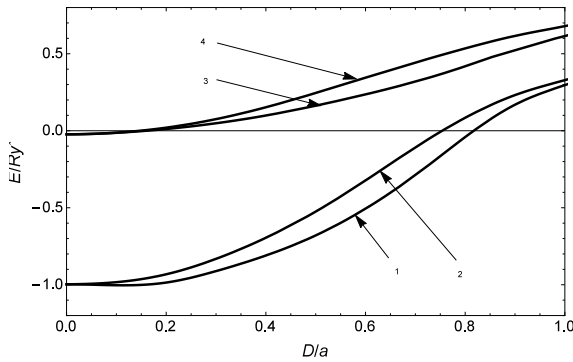


Рис. 1. Енергія дірки у КТ з нецентральною йоном акцепторної домішки у сферичній КТ як функція розташування йона домішки. Радіус КТ $a = 25 \text{ \AA}$.

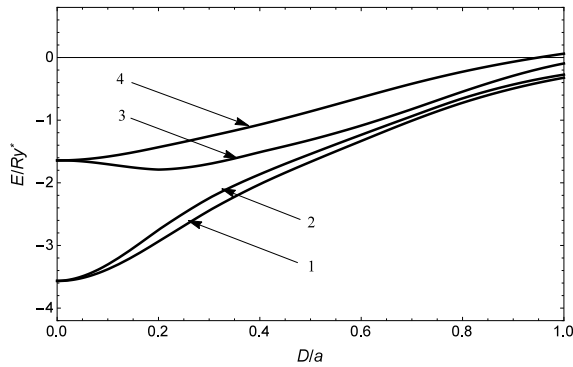


Рис. 2. Енергія дірки у КТ з двома діаметрально розташованими йонами акцепторної домішки у сферичній КТ як функція їх розташування. Крива 1 — енергія стану $\psi_{3/2,M;1,0}^I$ з $|M| = 3/2$, крива 2 — $\psi_{3/2,M;1,0}^I$ з $|M| = 1/2$, крива 3 — $\psi_{3/2,M;1,1}^{II}$ з $|M| = 3/2$, крива 4 — $\psi_{3/2,M;1,1}^{II}$ з $|M| = 1/2$. Радіус КТ $a = 25 \text{ \AA}$.

Аналогічні залежності отримано за наявності в КТ двох діаметрально розташованих йонів акцепторної домішки ($D_1 = D_2 = D$). У граничному випадку

розташування двох йонів у центрі отримано значення енергії, що відповідає енергії водневоподібної акцепторної домішки $Z = 2$. На відміну від одного йона домішки, два йони спричиняють менше розщеплення енергетичних рівнів основного стану та більше — для збудженого. Відповідно це все відобразиться на смугах міжрівневого поглинання світла.

Порівнюючи величини енергії дірки КТ для врахування взаємодії з одним (рис. 1) чи двома акцепторними йонами (рис. 2), можна зазначити, що енергія квазічастинкових станів у другому випадку є меншою. Дещо іншою є також залежність енергії від відстані домішкових йонів до центра КТ, хоча, як побачимо далі, енергія переходів для кожного D/a відрізняється незначно. Докладнішу інформацію можна отримати з аналізу спектрів міжрівневого поглинання світла.

Зважаючи на зазначене розщеплення, хвильову функцію дірки, що відповідає основному стану позначимо через $\Psi_{1,M}$, а збудженому — $\Psi_{2,M}$.

IV. КОЕФІЦІЄНТ МІЖРІВНЕВОГО ПОГЛИНАННЯ СВІТЛА

Розглянуто КТ з двома (одним) йонами акцепторної домішки, яка опромінюється лінійно поляризованим світлом уздовж осі Oz. Міжрівневі дипольні переходи дірки за наявності йона нецентральної акцепторної домішки обчислено на основі хвильових функцій (9). У дипольному наближенні отримано матричні елементи дипольного моменту міжрівневих переходів дірки. Аналіз 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 .

Коефіцієнт поглинання світла, що зумовлений міжрівневими переходами дірки нецентральної акцепторної домішки, визначено на основі формули з [16–18]:

$$\alpha_{1,|M|;2,|M|}(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0 \varepsilon}} N \frac{(|d_{1,|M|;2,|M|}|^2 + |d_{1,-|M|;2,-|M|}|^2) \hbar \Gamma}{(E_{2,|M|} - E_{1,|M|} - \hbar \omega)^2 + (\hbar \Gamma)^2}, \quad (11)$$

де ω — частота падаючої хвилі, ε_0 — електрична стала, μ_0 — магнітна стала, ε — діелектрична проникність КТ, $\hbar \Gamma$ — енергія релаксації, що зумовлена електрон-фононою взаємодією, $|M| = 1/2; 3/2$, N — концентрація КТ у матриці. Розгляньмо випадок низьких температур. Для цього спрямовано $\hbar \Gamma$ до нуля і враховано зображення дельта-функції. Отримано:

$$\begin{aligned} \alpha_{1,|M|;2,|M|}(\omega) &= \lim_{\hbar \Gamma \rightarrow 0} \omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0 \varepsilon}} N \frac{(|d_{1,|M|;2,|M|}|^2 + |d_{1,-|M|;2,-|M|}|^2) \hbar \Gamma}{(E_{2,|M|} - E_{1,|M|} - \hbar \omega)^2 + (\hbar \Gamma)^2} \\ &= \omega \pi \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0 \varepsilon}} N (|d_{1,|M|;2,|M|}|^2 + |d_{1,-|M|;2,-|M|}|^2) \delta(E_{2,|M|} - E_{1,|M|} - \hbar \omega). \end{aligned} \quad (12)$$

На практиці сукупність КТ характеризується дисперсією за розмірами. Нехай розподіл за розмірами, який спричинює неоднорідне розширення спектральних ліній, описується функцією Гаусса:

$$g(s, \bar{a}, a) = \frac{1}{s\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(a - \bar{a})^2}{2s^2}\right), \quad (13)$$

де a — радіус будь-якої КТ (змінна величина), s — півширина розподілу (13), \bar{a} — середній радіус КТ. Тоді величина дисперсії за розмірами $\sigma = s/\bar{a}$ 100%. З урахуванням дисперсії КТ коефіцієнт поглинання системи КТ зобразимо формулою:

$$\alpha_{1,|M|;2,|M|;\text{system}}(\omega) = \omega\pi\sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0\varepsilon}}N \int \left[g(s, \bar{a}, a) \left(|d_{1,|M|;2,|M|}(a)|^2 + |d_{1,-|M|;2,-|M|}(a)|^2 \right) \times \right. \quad (14)$$

Після використання властивості дельта-функції:

$$\left. \times \sum_i \frac{\delta(a - a_{0i})}{\left| \frac{d}{da} (E_{2,|M|}(a) - E_{1,|M|}(a) - \hbar\omega) \right|_{a=a_{0i}}} da \right], \quad (15)$$

де a_{0i} — прості нулі функції $F(a) = E_{2,|M|}(a) - E_{1,|M|}(a) - \hbar\omega$.
Отже,

$$\alpha_{1,|M|;2,|M|;\text{system}}(\omega) = \omega\pi\sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0\varepsilon}}N \sum_i \frac{g(s, \bar{a}, a_{0i}) \left(|d_{1,|M|;2,|M|}(a_{0i})|^2 + |d_{1,-|M|;2,-|M|}(a_{0i})|^2 \right)}{\left| \frac{d}{da} (E_{2,|M|}(a) - E_{1,|M|}(a) - \hbar\omega) \right|_{a=a_{0i}}}. \quad (16)$$

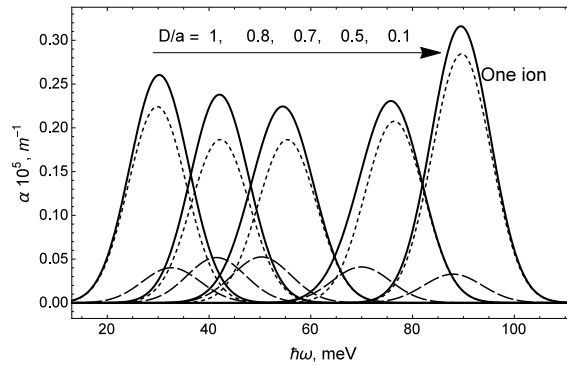


Рис. 3. Коефіцієнт поглинання системи КТ при $\bar{a} = 25 \text{ \AA}$, що зумовлений міжривневими переходами дірки акцепторної домішки. Штрихові криві задають $\alpha_{1,1/2;2,1/2}$, пунктирні — $\alpha_{1,3/2;2,3/2}$, суцільні криві відповідають сумарному коефіцієнту поглинання.

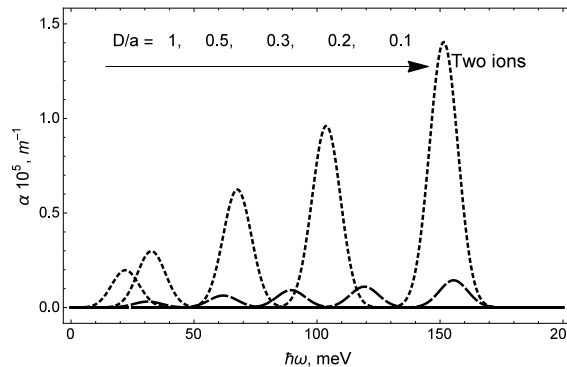


Рис. 4. Коефіцієнт поглинання системи КТ при $\bar{a} = 25 \text{ \AA}$, що зумовлений міжривневими переходами дірки у КТ з двома йонами акцепторної домішки. Штрихові криві задають $\alpha_{1,1/2;2,1/2}$, пунктирні — $\alpha_{1,3/2;2,3/2}$.

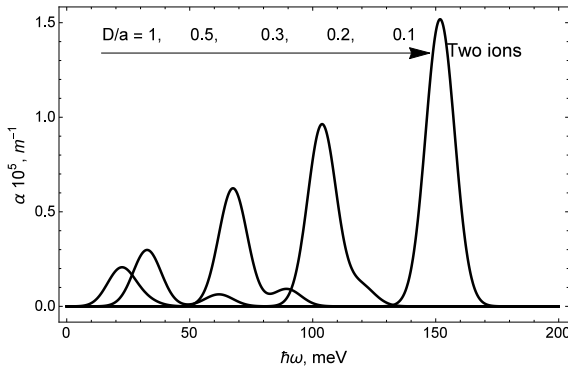


Рис. 5. Коефіцієнт поглинання системи КТ при $\bar{a} = 25 \text{ \AA}$, що зумовлений міжрівневими переходами дірки у КТ з двома йонами акцепторної домішки.

Використовуючи формулу (16), побудували залежності коефіцієнта поглинання електромагнітних хвиль від енергії падаючого кванта для середнього розміру КТ 25 \AA та дисперсії КТ за розмірами $\sigma = 5\%$.

Залежність коефіцієнта поглинання від енергії падаючого кванта, а також розташування домішок зображено на рис. 3–5.

Аналіз графіків показує, що поглинання світла, що зумовлене переходами між станами з $|M| = 1/2$, є меншим, ніж з $|M| = 3/2$. Також видно, що поглинання світла КТ з двома йонами домішок відбувається інтенсивніше, ніж з одним (піки поглинання вищі). Причиною такого результату є збільшення матричного елемента дипольного моменту міжрівневих

переходів за умови існування у КТ двох домішкових атомів. Також видно, що зміщення йонів домішок до центра КТ веде до зміщення відповідних смуг поглинання у високоенергетичну область спектра. Аналогічні результати отримано в КТ з донорною домішкою [14]. Причиною такого зміщення смуг поглинання є зближення відповідних енергетичних рівнів основного і збудженого станів із наближенням домішок до поверхні КТ, коли їхній вплив на енергетичний спектр дірки стає мінімальним.

V. ВИСНОВКИ

Отже, у запропонованій статті теоретично досліджено енергетичний спектр КТ з двома йонами акцепторної домішки в межах моделі Латтінджера. Це дало змогу встановити:

- часткове зняття виродження енергетичних рівнів за квантовим числом $|M|$;
- коефіцієнт поглинання світла у КТ з нецентральною домішкою й показати, що зміщення домішок від центра КТ зміщує смуги поглинання в низькоенергетичну область;
- що висота піків поглинання для двох домішок є більшою від однієї;
- що розташування смуг поглинання для двох йонів є зміщеним у високоенергетичну область порівняно з КТ з однією домішкою.

-
- [1] S. V. Gaponenko, *Optical Properties of Semiconductor Nanocrystals* (Cambridge university press, Cambridge, 1998).
- [2] D. Bimberg, M. Grundmann, N. N. Ledentsov, *Quantum Dot Heterostructures* (Wiley, Chichester, 1999).
- [3] Lamberti Carlo, *Characterization of Semiconductor Heterostructures and Nanostructures* (Elsevier, Amsterdam, 2008).
- [4] J.-L. Zhu, X. Chen, *Phys. Rev. B* **50**, 4497 (1994).
- [5] А. Ф. Полупанов, В. И. Галиев, М. Г. Новак, *Фіз. техн. полупр.* **31**, 1375 (1997).
- [6] М. В. Ткач, В. А. Головацький, Я. М. Березовский, *Фіз. хім. тверд. тіла* **4**, 213 (2003).
- [7] V. I. Boichuk, I. V. Bilynskiy, R. Ya. Leshko, *Ukr. J. Phys.* **53**, 991 (2008).
- [8] V. I. Boichuk, I. V. Bilynskiy, R. Ya. Leshko, *Condens. Matter Phys.* **4**, 653 (2008).
- [9] V. A. Holovatsky, O. M. Makhanets, O. M. Voitsekhivska, *Physica E* **41**, 1522 (2009).
- [10] V. I. Boichuk, I. V. Bilynskiy, R. Ya. Leshko, *Condensed Matter Physics*, **13**, 13702 (2010).
- [11] V. I. Boichuk, R. Ya. Leshko, I. V. Bilynskiy, L. M. Turyanska, *Condens. Matter Phys.* **15**, 33702 (2012).
- [12] Y. Yakar, D. Cakir, A. Ozmen, *Opt. Commun.* **283**, 1795 (2010).
- [13] W. Xie, *Superlattice. Microst.* **48**, 239 (2010).
- [14] V. I. Boichuk, I. V. Bilynskiy, R. Ya. Leshko, L. M. Turyanska, *Physica E* **44**, 476 (2011).
- [15] В. І. Бойчук, Р. Я. Лешко, І. В. Білінський, Л. М. Турянська, *Фіз. хім. тверд. тіла* **13**, 319 (2012).
- [16] G. Rezaei, M. R. K. Vahdani, M. Barati, *J. Nanoelectron. Optoelectron.* **3**, 159 (2008).
- [17] M. R. K. Vahdani, G. Rezaei, *Phys. Lett. A* **373**, 3079 (2009).
- [18] G. Rezaei, M. R. K. Vahdani, B. Vaseghi, *Current Appl. Phys.* **11**, 176 (2011).
- [19] E. Sadeghi, A. Avazpour, *Physica B* **406**, 241 (2011).
- [20] S. S. Li, J. B. Xia, *Phys. Lett. A* **366**, 120 (2007).
- [21] W. Xie, *Physica B*, **405**, 3436 (2010).
- [22] Б. Л. Гельмонт, М. И. Дьяконов, *Фіз. техн. полупр.* **5**, 2191 (1971).
- [23] Г. Б. Григорян *и др.*, *Фіз. тверд. тела* **32**, 1772 (1990).
- [24] J. M. Luttinger, W. Kohn, *Phys. Rev.* **97**, 869888 (1955).
- [25] A. Baldereshi, Nunzio O. Lipari, *Phys. Rev. B* **8**, 2697 (1973).
- [26] Iu. Nasioka *et al.*, *Phys. Status Solidi C* **11**, 1510 (2014).
- [27] В. А. Головацький, І. Б. Франків, *Журн. фіз. досл.* **16**, 1706 (2012).
- [28] W. Wu, D. Dey, H. Mohseni, *J. Phys. D* **43**, 155101 (2010).

- [29] S. Wang, X.C. Zhang, *J. Phys. D* **37**, R1 (2014).
 [30] A.J. Huber, F. Keilmann, J. Wittborn, J. Aizpurua, R. Hillenbrand, *Nano Lett.* **8**, 3766 (2008).
 [31] R. Piesiewicz, M. Jacob, M. Koch, J. Schoebel, T. Krner, *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **14**, 421 (2008).
 [32] Б. И. Шкловский, А. Л. Эрос, *Электронные свойства легированных полупроводников* (Наука, Москва, 1979).
 [33] O. Madelung, *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology* (Springer, Berlin, 1986).
 [34] U. E. H. Laheld, G. T. Einevoll, *Phys. Rev. B* **55**, 5184 (1997).
 [35] E. Menendez-Proupin, C. Trallero-Giner, A. Garcia-Cristobal, *Phys. Rev. B* **60**, 5513 (1999).

THE EFFECT OF THE NEIGHBORING IMPURITY ION ON THE ACCEPTOR INTERLEVEL LIGHT ABSORPTION BY CdSe NANOCRYSTALS

V. I. Boichuk, R. Ya. Leshko, V. B. Holskyi, D. S. Carpin

*Franko Drohobych Pedagogical University,
 Department of Theoretical and Applied Physics and Computer Modelling,
 Stryiska St., 3, Drohobych, 82100, Ukraine
 e-mail: leshkoroman@gmail.com*

By the use of the spherical multi-band approximation (in the case of strong spin-orbit coupling) of the Luttinger model, the calculation of the energy spectrum of holes in a spherical quantum dot has been done in the case of one and two ions of the acceptor impurity. The solution of the Schrödinger equation was held by expanding an unknown wave function over the full system of wave functions describing a spherical quantum dot without impurities. The dependence of the energy levels of the hole on the impurities location has been defined. The results show the splitting of energy levels when impurities located not in the center of the spherical quantum dot. Also we compare energy levels in the cases of one and two impurities. Although energy values for these two cases are very different, the transition energies are quite close by the value wise. The influence of impurities on the interlevel transitions in the spherical quantum dot was determined. The selection rules of interlevel dipole absorption has been determined. The coefficient of light absorption caused by the interlevel transitions of holes has been calculated with respect to the quantum dots size dispersion. The obtained results are in good agreement with those of other theoretical works.