

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ЧЕРНІВЕЦЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ЮРІЯ ФЕДЬКОВИЧА

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

Чубрей Марина Віталіївна

УДК 537.311.322-022.513.2:535.34

ДИСЕРТАЦІЯ

**ВПЛИВ ЗОВНІШНІХ ПОЛІВ НА ПЕРЕРІЗ ФОТОІОНІЗАЦІЇ ДОМІШКИ
ТА КОЕФІЦІЄНТ ПОГЛИНАННЯ СВІТЛА В СФЕРИЧНИХ
НАНОСТРУКТУРАХ**

104 «Фізика та астрономія»

10 «Природничі науки»

Подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії

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

Науковий керівник – **Головацький Володимир Анатолійович**, доктор фізико-математичних наук, професор

Чернівці – 2025

АНОТАЦІЯ

Чубрей М. В. Вплив зовнішніх полів на переріз фотоіонізації домішки та коефіцієнт поглинання світла в сферичних наноструктурах. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія» (10 – Природничі науки). – Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, Чернівці, 2025.

Дисертація присвячена теоретичному вивченню впливу зовнішніх полів та домішки на оптичні та фотоелектричні властивості багатошарових сферичних квантових точок, зокрема квантових точок I та II типу, які характеризуються специфічним профілем енергетичних зон в зоні контакту, що визначає просторове розділення носіїв заряду та їх кулонівську взаємодію. Дослідження виконувались для одноямних та двоямних наноструктур різних розмірів у наближенні прямокутних потенціальних бар'єрів та моделі ефективної маси. Для розрахунку хвильових функцій електрона та його енергетичного спектра використано матричний метод, згідно якого хвильову функції шукають у вигляді розкладу за повним базисом хвильових функцій, що є точними розв'язками рівняння Шредінгера для наносистеми без впливу зовнішніх полів та домішок.

У **вступі** розкрито актуальність теми дисертації, зазначено її зв'язок із науковими програмами та планами, визначено завдання і мету дослідження, розкрито наукове і практичне значення отриманих результатів. Наведено дані про публікації, апробацію результатів, особистий внесок здобувача та описано структуру й обсяг дисертації.

У **першому** розділі дисертації проведено огляд та аналіз наукових робіт, які присвячені теоретичним і експериментальним дослідженням, що стосуються теми дисертації. Детально розглянуто властивості квантових точок типу «ядро-оболонка» I та II типу, їхні відмінності та застосування в оптоелектроніці.

Проаналізовано основні методи створення квантових точок: підхід «зверху-вниз», що охоплює фізичні та хімічні методи, і підхід «знизу-вгору», який включає хімічне осадження та самоскладання, вказано переваги кожного з підходів та їхнє значення для отримання високоякісних наноструктур. Також у розділі розглянуто застосування квантових точок у сонячних елементах, світлодіодах, лазерах, біомедичних технологіях і квантових обчисленнях. Окремо наголошено на важливості дослідження впливу зовнішніх полів та домішок на енергетичний спектр електронів, сили осцилятора, енергію зв'язку електрона з домішкою, коефіцієнти поглинання та поперечний переріз фотоіонізації домішки. Також, на основі попередніх теоретичних досліджень, було описано основні методи та підходи, які використовуються для теоретичного дослідження спектрів квазічастинок у квантових точках.

У **другому** розділі роботи досліджується вплив зовнішніх електричних та магнітних полів на фотоелектричні властивості водневоподібної домішки в багат шарових сферичних квантових точках. Зокрема розглядається явище фотоіонізації домішки, яке характеризується перерізом фотоіонізації домішки, що визначає ймовірність іонізації атомів або домішок в квантових точках під дією світла.

Основна мета розділу полягає у дослідженні енергетичного спектру, енергії зв'язку електрона з домішкою та поперечного перерізу фотоіонізації в однамних та двоямних багат шарових сферичних квантових точках під впливом електричного і магнітного полів. Для цього необхідно розв'язати рівняння Шредінгера, яке було обчислене матричним методом із використанням моделі ефективної маси та прямокутного потенціалу. Результати показали, що зміна розмірів квантової точки та збільшення інтенсивності полів суттєво змінюють локалізацію електрона, змінюючи енергію зв'язку електрона з домішкою та поперечний переріз фотоіонізації.

Окремо розглянуто вплив електричного поля на поперечний переріз фотоіонізації домішки у багат шаровій сферичній квантовій точці $Al_xGa_{1-x}As/$

$GaAs/Al_yGa_{1-y}As$, яка вбудована в широкозонну матрицю. Для спрощення розрахунків розглянуто випадок, коли поле паралельне осі Oz . У цих умовах гамільтоніан зберігає циліндричну симетрію, а електронні стани описуються магнітним квантовим числом. Отримано, що найвищий пік перерізу фотоіонізації домішки спостерігається, коли домішка розташована в центрі потенціальної ями, тоді як зростання інтенсивності електричного поля знижує енергію зв'язку домішки, змінюючи поперечний переріз фотоіонізації. Також розглянуто комбінований вплив магнітного поля і положення донорної домішки на поперечний переріз фотоіонізації у аналогічній квантовій точці. Показано, що для центральної домішки магнітне поле зміщує пік поперечного перерізу фотоіонізації у низькоенергетичну область, а для нецентральної — поперечний переріз фотоіонізації має декілька піків, що відповідають різним міжпідзонним квантовим переходам. Окрім цього, було вивчено вплив магнітного поля на енергетичний спектр, хвильові функції електронів та кулонівську взаємодію електрон-домішка для різних розмірів квантової точки. Виконано порівняння результатів отриманих матричним методом та методом скінченних елементів, що підтвердило високу точність та ефективність першого.

Досліджено вплив магнітного поля на переріз фотоіонізації домішки та коефіцієнт поглинання в квантовій точці яка складається з ядра $GaAs$ і двох оболонок $Al_xGa_{1-x}As$ і $GaAs$, де ядро і зовнішня оболонка утворюють дві потенціальні ями для електрона, а внутрішній шар є потенціальним бар'єром.

У залежності від індукції магнітного поля та геометричних параметрів наносистеми електрон може бути локалізованим у різних потенціальних ямах, що супроводжується антикросингом енергетичних рівнів. Це дозволяє коригувати розподіл електронної густини, а отже, і оптичними властивостями наноструктури особливо в області антикросингу, де вони найбільш чутливі до домішок та зовнішніх полів.

Показано, що зменшення розміру зовнішньої потенціальної ями зміщує піки поперечного перерізу фотоіонізації і коефіцієнта поглинання у високоенергетичну

область, підсилюючи вплив квантових переходів у збуджені стани на оптичні характеристики. Встановлено, що магнітне поле з індукцією 10-15 Тл впливає на оптичні характеристики наносистеми подібно до зменшення товщини зовнішньої оболонки.

У **третьому** розділі вивчено вплив електричного і магнітного полів на лінійні та нелінійні коефіцієнти поглинання світла в багат шарових сферичних квантових антиточках $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ з домішками та без них. Розглянуто залежності енергетичного спектру, хвильових функцій, енергій зв'язку, сили осцилятора, поляризованості домішки та коефіцієнтів поглинання від зовнішніх полів, розміру наноструктури й наявності домішок.

У цьому розділі окремо досліджено вплив магнітного поля на оптичне поглинання в сферичній квантовій антиточці ядро-оболонка з домішкою, яка розташована в центрі потенціальної ями. Встановлено, що на енергетичні рівні та хвильові функції електрона суттєво впливають розміри ядра, інтенсивність магнітного поля та розташування домішки. Показано, що у менших наноструктурах домінує лінійний коефіцієнт поглинання, тоді як у більших структурах із посиленням магнітного поля, нелінійний коефіцієнт поглинання суттєво зростає, що свідчить про підвищену чутливість такої системи до магнітних впливів. У випадку наявності нецентральної домішки коефіцієнт поглинання значно зменшується, і цей ефект посилюється зі збільшенням індукції магнітного поля та розміру квантової точки.

Досліджено комбінований вплив зовнішніх електричного та магнітного полів на оптичне поглинання в сферичній квантовій антиточці без домішки. Зокрема, розглядається, як ці поля змінюють енергетичний спектр електронів, розподіл густини електронів у наносистемі та силу осцилятора квантових переходів. Показано, що електричне поле спричиняє зниження енергії основного стану електронів, тоді як збуджені стани суттєво змінюються лише при високих напруженостях електричного поля. Магнітне поле, у свою чергу, зсуває всі енергетичні рівні в область вищих енергій, причому цей вплив посилюється зі

збільшенням розміру ядра. Виявлено, що внаслідок різного впливу зовнішніх полів на різні електронні стани спостерігається явище антикросингу енергетичних рівнів. Показано, що збільшення напруженості електричного поля зміщує енергію квантових переходів у бік вищих енергій, окрім переходу $1p - 1d$ при $B = 30$ Тл. Магнітне поле, посилює поглинання для низькоенергетичних переходів лише при слабкому електричному полі, при цьому загальний коефіцієнт поглинання для низьких енергій стає від'ємним, що пояснюється зміщенням піку нелінійного поглинання в область низьких енергій.

Розглянуто одночасний вплив електричного і магнітного полів на оптичні властивості електрона в квантовій антиточці з донорною домішкою, яка розташована в центрі потенціальної ями, вздовж осі Oz . Досліджено залежність енергетичного спектру електрона від напруженості співнаправлених електричного і магнітного полів, а також проаналізовано ефекти антикросингу енергетичних рівнів. У результаті дослідження впливу зовнішніх полів на енергію зв'язку електрона з домішкою отримано, що магнітне поле підвищує енергію зв'язку, утримуючи електрон ближче до домішки, тоді як електричне поле може як підсилювати, так і послаблювати цей зв'язок залежно від свого напрямку. Аналіз коефіцієнтів поглинання показав, що їхні піки зміщуються в область вищих енергій зі збільшенням напруженості полів, а їх висота змінюється залежно від величини полів. Також досліджено вплив полів і розміру квантової точки на поляризованість: зі збільшенням розміру квантової точки поляризованість зростає, а під дією високих електричних полів вона спершу різко збільшується, досягає максимуму, а потім поступово зменшується. Водночас вплив магнітного поля на поляризованість є незначним.

У четвертому розділі розглядається вплив зовнішніх електричного і магнітного полів на оптичні властивості квантових точок ядро-оболонка II типу, таких як $CdSe/ZnTe$ та $ZnTe/CdSe$. Показано, що прикладені зовнішні електричні й магнітні поля порушують сферичну симетрію системи, змінюючи правила відбору для оптичних переходів. Проаналізовано вплив електричного та магнітного

полів на енергетичний спектр квазічастинок, силу осцилятора та енергію міжзонних переходів, енергії зв'язку та час життя екситона. Розрахунки показали, що зовнішнє електричне поле сприяє просторовому розділенню носіїв заряду, зменшенню кулонівської взаємодії між електроном і діркою та збільшенню часу життя екситонів. Магнітне поле, у свою чергу, усуває виродження енергетичних рівнів за магнітним квантовим числом і викликає осциляції Ааронова–Бома для певних квантових переходів, а також сприяє посиленню кулонівської взаємодії між електроном і діркою.

Практичне значення отриманих результатів

Розуміння особливостей залежностей енергетичного спектру електрона, поперечного перерізу фотоіонізації домішки та коефіцієнта поглинання у квантових точках I та II типу від характеристик зовнішніх полів дозволяє створювати наносистеми з потрібними оптичними характеристиками. Такі системи можуть бути використані в оптоелектронних пристроях, зокрема сонячних елементах, фотодетекторах, регульованих джерелах світла й у квантових обчисленнях.

Вплив зовнішніх полів та домішок на коефіцієнт поглинання у багат шарових сферичних квантових точках може бути використаним для керування здатністю матеріалу поглинати світло в певних спектральних діапазонах, що є критично важливим для створення ефективних оптоелектронних пристроїв. Отримані залежності поперечного перерізу фотоіонізації домішки від її положення у багат шаровій сферичній квантовій точці та від інтенсивності полів дозволяють визначити умови для максимально ефективної фотоіонізації. Це робить квантові точки придатними для використання у високочутливих і швидкодійних пристроях, зокрема квантових сенсорах, сонячних елементах і фотодетекторах. Також можливо визначити умови, за яких значення поперечного перерізу фотоіонізації мінімізується, що важливо для пристроїв, де критичним є точність, стабільність і мінімальне поглинання енергії, таких як спеціалізовані датчики та низькоенергетичні фотонні системи.

Ключові слова: квантова точка, енергетичний спектр (стан), сила осцилятора, домішка, електричне поле, магнітне поле, наноструктура (система), електрон, екситон, дірка, рівняння Шредінгера, ефективна маса, потенціальний бар'єр, фотоелектричні властивості.

ABSTRACT

M. V. Chubrei. The effect of external fields on the impurity photoionization cross-section and light absorption coefficient in spherical nanostructures. Qualified scientific work as a manuscript.

Thesis on search for the Doctor of Philosophy degree in specialty 104 «Physics and Astronomy» (10 – Natural Sciences). – Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University, Ministry of Education and Science of Ukraine, Chernivtsi, 2025.

The dissertation is dedicated to the theoretical study of the influence of external fields and impurities on the optical and photoelectric properties of multilayered spherical quantum dots. Particular attention is paid to type I and type II quantum dots, which are characterized by a specific energy band profile at the contact region, defining the spatial separation of charge carriers and their Coulomb interaction.

The study was conducted for single well and double well nanostructures of various sizes, using the approximation of rectangular potential barriers and the effective mass model. To calculate the electron wave functions and its energy spectrum, a matrix method was employed, in which the wave function is expressed as a expansion in a complete basis set of wave functions that are exact solutions of the Schrödinger equation for the nanostructure without the influence of external fields and impurities.

The introduction outlines the relevance of the dissertation topic, highlights its connection with scientific programs and plans, defines the objectives and purpose of the research, and reveals the scientific and practical significance of the obtained results. It provides information about publications, the approbation of results, the structure and scope of the dissertation.

The first chapter of the dissertation presents a review and analysis of scientific works dedicated to theoretical and experimental studies related to the dissertation topic. The properties of core-shell quantum dots of types I and II, their differences, and applications in optoelectronics are discussed in detail. The main methods of fabricating quantum dots are analyzed, including the "top-down" approach, which encompasses physical and chemical techniques and the "bottom-up" approach, which encompasses chemical deposition and self-assembly methods. The advantages of each approach and their significance in producing high-quality nanostructures are highlighted. The chapter also explores the applications of quantum dots in solar cells, LEDs, lasers, biomedical technologies, and quantum computing. Special emphasis is placed on studying the influence of external fields and impurities on the energy spectrum of electrons and oscillator strengths. The binding energy of an electron with an impurity, absorption coefficients, and the impurity photoionization cross-section are also considered. Additionally, based on previous theoretical studies, the chapter discusses the main methods and approaches used for the theoretical investigation of quasiparticle spectra in quantum dots.

The second chapter of the dissertation examines the influence of external electric and magnetic fields on the photoelectric properties of a hydrogen-like impurity in multilayered spherical quantum dots. The chapter specifically considers impurity photoionization, characterized by the photoionization cross-section. This parameter determines the probability of ionization of atoms or impurities in quantum dots under the influence of light.

The purpose of this chapter is to investigate the energy spectrum, the interaction energy between an electron and an impurity, and the photoionization cross-section in multilayered spherical quantum dots influenced by external electric and magnetic fields. Single well and double well spherical quantum dots are under research. The Schrödinger equation was solved using the matrix method within the framework of the effective mass approximation and the rectangular potential model. The results indicate that adjustments in the quantum dot's size and stronger external fields significantly influence the electron's

spatial distribution, resulting in measurable changes to the electron-impurity interaction energy and photoionization cross-section.

The influence of an electric field on the photoionization cross-section of an impurity in a $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_yGa_{1-y}As$ multilayered spherical quantum dot embedded in a matrix-barrier, is analyzed. To simplify calculations, scenarios where the field is directed parallel to the Oz axis are considered. Under these conditions, the Hamiltonian retains cylindrical symmetry, and the electronic states are described by the magnetic quantum number. The results indicate that the highest observed peak of the photoionization cross-section is found when the impurity is located at the center of the potential well. Increasing the electric field intensity reduces the impurity's binding energy, modifying the photoionization cross-section. The combined influence of a magnetic field and the donor impurity's position on the photoionization cross-section in a similar quantum dot is also examined. It is shown that, for a central impurity, the magnetic field shifts the photoionization cross-section peak to the low-energy region, while with an off-centre impurity, the photoionization cross-section has several peaks corresponding to different intraband quantum transitions. Additionally, the impact of the magnetic field on the electron energy spectrum, wave functions and Coulomb interaction between electron and impurity for various quantum dot sizes is analyzed. A comparison of results obtained using the matrix method and the finite element method confirms the former's high accuracy and efficiency.

The influence of a magnetic field on the impurity photoionization cross-section and the absorption coefficient in a quantum dot with a $GaAs$ core and two shells, $Al_xGa_{1-x}As$ and $GaAs$, is investigated. In this configuration, the core and outer shell form two potential wells for the electron, while the inner layer acts as a potential barrier.

Depending on the magnetic field induction and the geometric parameters of the nanosystem, the electron can be localized in different potential wells, which is accompanied by energy level anticrossing. This allows to adjust the electron density distribution and, consequently, the optical properties of the nanostructure, particularly in the anticrossing region, where these properties are most sensitive to impurities and

external fields.

It is shown that reducing the size of the external potential well shifts the position of the peaks of the photoionization cross section and the absorption coefficient to the high-energy region, enhancing the influence of quantum transitions to excited states on the optical characteristics. It is established that a magnetic field strength of $10 - 15 \text{ T}$ has an effect on the optical properties of the nanosystem similar to that of reducing the thickness of the outer shell.

The third chapter focuses on the effects of electric and magnetic fields on the linear and nonlinear light absorption coefficients in multilayered spherical quantum antidots $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ with and without impurities. Dependencies of the wave functions, energy spectrum, oscillator strengths, binding energies, impurity polarization, and absorption coefficients on external fields, nanostructure size, and impurity presence were analyzed.

This chapter separately examines the effect of the magnetic field on the optical absorption in a spherical core-shell quantum antidot with impurity located at the center of the potential well. The analysis shows that the electron's energy levels and wave functions are significantly influenced by the core size, magnetic field intensity, and impurity position. Results indicate that in smaller nanostructures, the linear absorption coefficient dominates, in contrast, in larger structures, an increase in magnetic field strength causes a significant rise in the nonlinear absorption coefficient, reflecting enhanced sensitivity to magnetic effects. In the presence of an off-center impurity, the absorption coefficient decreases significantly, and this effect becomes more pronounced with increasing magnetic field induction and the quantum dot size.

The combined effect of external electric and magnetic fields on optical absorption in a spherical quantum antidot without impurities was investigated. Specifically, how these fields alter the electronic energy spectrum, the electron density distribution in the nanosystem, and the oscillator strengths of quantum transitions is analyzed. Results show that an electric field reduces the ground-state energy of electrons, while higher energy states are significantly affected only under strong electric field intensities. The magnetic

field, on the other hand, shifts all energy levels toward higher energies; this effect is more pronounced in quantum antidots with larger core sizes. It was found that due to the different effect of external fields on different electronic states, the phenomenon of energy levels anticrossing is observed. When examining the combined impact of these fields on the absorption coefficient, it is observed that an increase in the electric field intensity generally shifts the quantum transition energies to higher energy ranges, except for the $1p - 1d$ transition at $B = 30$ T. For low-energy transitions, the magnetic field enhances absorption only under weak electric fields. Moreover, the total absorption coefficient at low energies becomes negative, which is explained by the shift of the nonlinear absorption peak toward the lower energy region.

The combined influence of electric and magnetic fields on the optical properties of an electron confined in a quantum antidot with a donor impurity is investigated. The donor impurity is located at the center of the potential well along the Oz axis. The analysis explores how the energy spectra of the electron's states vary with the strength of the co-directed electric and magnetic fields, including the occurrence of energy level anticrossings. Furthermore, the impact of these external fields on the electron-impurity binding energy is examined, demonstrating that the binding energy is influenced by the interaction between the electric and magnetic fields. The magnetic field enhances the binding energy by confining the electron closer to the center, while the electric field's effect on the binding energy depends on its orientation, potentially increasing or decreasing it. Analysis of the absorption coefficients showed that their peaks shift to higher energies with increasing field strength, and their height varies depending on the field strength. The influence of external fields and the size of the quantum dot on impurity polarizability was also investigated. It was found that polarizability increases with the size of the quantum dot. As the electric field strength increases, polarizability initially rises rapidly, reaches its maximum, and then decreases. At the same time, the influence of the magnetic field on polarizability is insignificant.

The fourth chapter explores the influence of external electric and magnetic fields on the optical characteristics of type-II core-shell quantum dots, such as $CdSe/ZnTe$ and

ZnTe/CdSe. It is shown that the applied external electric and magnetic fields break the spherical symmetry of the system and change the selection rules. Using the matrix method within the effective mass approximation, the study analyzes the effects of electric and magnetic fields on various properties, such as the quasiparticle energy spectrum, oscillator strength, interband transition energies, binding energies, and exciton lifetime. The calculations showed that the external electric field contributes to the spatial separation of charge carriers, reduces the Coulomb interaction between the electron and the hole, and increases the exciton lifetime. The magnetic field, in turn, removes the degeneracy of the energy levels with respect to the magnetic quantum number and causes Aharonov-Bohm oscillations for certain quantum transitions. Additionally, it enhances the Coulomb interaction between the electron and the hole.

Practical significance of the obtained results

Understanding the features of the dependences of the electron energy spectrum, the photoionization cross-section of impurities, and the absorption coefficient in type I and type II quantum dots on the characteristics of external fields makes it possible to create nanosystems with desired optical characteristics for various optoelectronic devices, such as solar cells, tunable light sources, photodetectors, and quantum computing devices. The influence of external fields and impurities on the absorption coefficient in multilayered spherical quantum dots can control the material's ability to absorb light in specific spectral ranges, which is essential for creating efficient optoelectronic devices. The obtained dependencies of the impurity photoionization cross-section on the impurity's position within the multilayered spherical quantum dot and on the intensity of external fields helps identify conditions for the most efficient photoionization. Such conditions are ideal for designing high-sensitivity, fast-response devices like quantum sensors, solar cells, and photodetectors. Conversely, identifying conditions that minimize the photoionization cross-section is valuable for devices requiring precision, stability, and minimal energy absorption. These include specialized sensors and low-energy photonic systems, where minimized energy absorption is critical for optimal functionality.

Keywords: quantum dot, energy spectrum (state), oscillator strength, impurity,

electric field, magnetic field, nanostructure (system), electron, exciton, hole, Schrödinger equation, effective mass, potential barrier, photoelectric properties.

Список публікацій за темою дисертації

Наукові статті, опубліковані у виданнях, що входять до списку наукових фахових видань України та проіндексованих у наукометричних базах даних Web of Science Core Collection та/або Scopus

1. Головацький В., Яхневич М., Чубрей М. Вплив магнітного поля та нецентральної домішки на енергетичний спектр електрона в сферичній багатошаровій наносистемі. *Журнал нано- та електронної фізики*. 2019. Т. 11, № 1. С. 01007:1-5. (Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки енергетичного спектра та хвильової функції електрона).
2. Holovatsky V. A., Chubrei M. V., Yurchenko O. M. Impurity photoionization cross-section and intersubband optical absorption coefficient in multilayer spherical quantum dots. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2021. Vol. 22, No. 4. P. 630–637. (Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки енергетичного спектра та хвильової функції електрона).

Наукові статті, опубліковані у періодичних наукових виданнях, проіндексованих у наукометричних базах даних Web of Science Core Collection та/або Scopus

3. Holovatsky V., Chubrey M., Voitsekhivska O. Effect of electric field on photoionisation cross-section of impurity in multilayered quantum dot. *Superlattices and Microstructures*. 2020. Vol. 145. P. 106642. (Особистий внесок автора: розраховано енергетичний спектр та хвильові функції електрона, енергію зв'язку електрона з домішкою, переріз фотоіонізації домішки та здійснено аналіз отриманих результатів).
4. Holovatsky V., Holovatska N., Chubrei M. Optical absorption, photoionization and binding energy of shallow donor impurity in spherical multilayered quantum dot. *Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering. Fifteenth*

International Conference on Correlation Optics. 2021. Vol. 12126. P. 1212603. (Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки енергетичного спектра та хвильової функції електрона).

5. Chubrei M. V., Holovatsky V. A., Duque, C. A. Effect of magnetic field on donor impurity-related photoionisation cross-section in multilayered quantum dot. *Philosophical Magazine*. 2021. Vol. 145, No. 24. P. 2614–2633. (Особистий внесок автора: розраховано енергетичний спектр електрона, енергію електрон-домішкових переходів, переріз фотіонізації домішки та проаналізовано отримані результати).

6. Holovatsky V. A., Chubrei M. V., Duque C. A. Core-shell type-II spherical quantum dot under externally applied electric field. *Thin Solid Films*. 2022. Vol. 747. P. 139142. (Особистий внесок автора: частково виконано аналітичні та чисельні розрахунки, проаналізовано отримані результати).

7. Holovatsky V. A., Chubrei M. V. Optical absorption in core-shell quantum antidot under applied co-directed electric and magnetic fields. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 2022. Vol. 751, No. 1. P. 149–157. (Особистий внесок автора: виконано комп'ютерні розрахунки енергетичного спектра електрона, сили осцилятора та коефіцієнтів поглинання).

8. Holovatsky V., Holovatskyi I., Chubrei M., Duque C. A. Theoretical modeling of magnetic field effects on the optical properties of type-II core-shell quantum dot. *Applied Nanoscience*. 2023. Vol. 13. No. 11. P. 7125–7133. (Особистий внесок автора: частково виконано аналітичні та чисельні розрахунки, проаналізовано отримані результати).

9. Chubrei M. V., Holovatsky V. A., Holovatska N. H. Optical absorption in core-shell quantum antidot with donor impurity under applied co-directed electric and magnetic fields. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 2024. Vol. 768, No. 3. P. 40–49. (Особистий внесок автора: виконано комп'ютерні розрахунки енергетичного спектра електрона, енергії зв'язку електрона з домішкою, коефіцієнтів поглинання та поляризованості домішки).

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації

10. Головацький В., Чубрей М. Вплив електричного поля на електронні стани, енергію зв'язку та поперечний переріз фотоіонізації воднеподібної домішки в багаточарових квантових точках. *Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології* (НАНСИС-2019): Тези VI Наук. конф. (Київ, 4–6 грудня 2019 р.) / редкол.: А. Г. Наумовець [та ін.]. Київ, 2019. С.29. *(Особистий внесок автора: побудовано та проаналізовано залежності енергії зв'язку, середньої відстані між електроном та іоном домішки від напруженості електричного поля та положення домішки).*
11. Головацький В., Чубрей М. Вплив електричного поля на електронні стани, енергію зв'язку та поперечний переріз фотоіонізації воднеподібної домішки в багаточарових квантових точках. *Релаксаційні, нелінійні, акустооптичні процеси і матеріали* : матер. X Міжнар. наук. конф. (Луцьк–Світязь, 25–29 черв. 2020 р.). Луцьк : Вежа-Друк, 2020. С.98-99. *(Особистий внесок автора: побудовано та проаналізовано залежності поперечного перерізу фотоіонізації від величини та напрямку електричного поля).*
12. Головацький В., Чубрей М. Лінійний та нелінійний коефіцієнти поглинання електромагнітних хвиль в наноструктурах з домішкою під впливом магнітного поля. *Актуальні проблеми фундаментальних наук* : матеріали IV Міжнар. наук. конф. (Луцьк – Світязь, 01 – 05 черв. 2021 р.). Луцьк: Вежа - Друк, 2021. С.152-153. *(Особистий внесок автора: побудовано та проаналізовано коефіцієнта поглинання від енергії падаючого фотона).*
13. Holovatsky V. A., Chubrei M. V. Optical absorption in core-shell quantum antidot under applied co-directed electric and magnetic fields. *International research and practice conference «Nanotechnology and nanomaterials» (NANO-2021)*. Abstract Book of participants of the International research and practice conference (Lviv, 25 – 27 August 2021) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC «Computer-publishing, information center», 2021. P. 430. *(Особистий внесок автора: описано теоретичну частину для*

отримання коефіцієнтів поглинання).

14. Holovatsky V., Chubrei M., Ivanko, V. Optical Absorption in Core-Shell Quantum Antidot with Donor Impurity under Applied Magnetic Field. *Proceedings of the 2021 IEEE 11th International Conference on “Nanomaterials: Applications and Properties”* (NAP-2021). 2021. P. IDNUM:1-5. (Особистий внесок автора: виконано комп'ютерні розрахунки енергетичного спектра електрона, енергій переходів та коефіцієнтів поглинання).

15. Chubrei M. V., Holovatsky V. A., Holovatska N. H. Optical absorption in core-shell quantum antidot with donor impurity under applied co-directed electric and magnetic fields. *The International research and practice conference “Nanotechnology and nanomaterials” (NANO-2022)*. Abstract Book of participants of the International research and practice conference (Lviv, 25–27 August 2022) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC APF POLYGRAPH SERVICE, 2022. P. 453. (Особистий внесок автора: виконано комп'ютерні розрахунки енергетичного спектра електрона, енергій зв'язку електрона з домішкою та коефіцієнтів поглинання).

16. Головацький В., Чубрей М., Гончарук С. Г. Вплив магнітного поля на оптичні властивості квантової точки II типу ZnTe/CdSe. *Релаксаційні, нелінійні, акустооптичні процеси і матеріали* : матер. XI Міжнар. наук. Конф (Луцьк, 1–5 черв. 2022 р.). Луцьк : Вежа-Друк, 2022. С.43. (Особистий внесок автора: виконано комп'ютерні розрахунки енергетичного спектра електрона).

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ.....	21
ВСТУП	22
РОЗДІЛ 1. АНАЛІЗ ПОПЕРЕДНІХ ДОСЛІДЖЕНЬ ПРОСТИХ, БАГАТОШАРОВИХ СФЕРИЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧОК І ТА ІІ ТИПУ ..	30
1.1. Квантові точки «ядро-оболонка» І та ІІ типу	30
1.2. Методи вирощування квантових точок	34
1.3. Практичне використання квантових точок	37
1.4. Методи та підходи для теоретичного обчислення спектрів квазічастинок у квантових точках.....	41
1.5. Домішка в квантових точках	45
1.6. Вплив електричного та магнітного полів на оптичні властивості квантових точок	49
Висновки до розділу 1	53
РОЗДІЛ 2. ВПЛИВ ЕЛЕКТРИЧНОГО ТА МАГНІТНОГО ПОЛІВ НА ПОПЕРЕЧНИЙ ПЕРЕРІЗ ФОТОІОНІЗАЦІЇ ВОДНЕВОПОДІБНОЇ ДОМІШКИ В БАГАТОШАРОВИХ СФЕРИЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧКАХ	55
2.1. Вплив електричного поля на поперечний переріз фотоіонізації домішки в одноточковій багатоточковій сферичній квантовій точці	56
2.1.1. Розв'язок рівняння Шредінгера для електрона у багатоточковій сферичній квантовій точці в електричному полі	56
2.1.2. Чисельний аналіз впливу електричного поля та положення домішки на енергетичний спектр та поперечний переріз фотоіонізації домішки.	61
2.2. Вплив магнітного поля на поперечний переріз фотоіонізації домішки в одноточковій багатоточковій сферичній квантовій точці	68
2.2.1. Розв'язок рівняння Шредінгера для електрона у багатоточковій сферичній квантовій точці у магнітному полі	68

2.2.2. Чисельний аналіз впливу магнітного поля та положення домішки на енергетичний спектр та поперечний переріз фотоіонізації домішки.....	73
2.2.3. Порівняння матричного методу і методу скінченних елементів для обчислення енергетичного спектру електрона	82
2.3. Вплив магнітного поля на коефіцієнт поглинання та поперечний переріз фотоіонізації домішки у двоямній багатошаровій сферичній квантовій точці	85
2.3.1. Розв'язок рівняння Шредінгера для електрона у багатошаровій сферичній квантовій точці з двома потенціальними ямами	85
2.3.2. Чисельний аналіз впливу магнітного поля, домішки та ширин потенціальних ям на оптичні властивості електрона.....	88
Висновки до розділу 2	94

РОЗДІЛ 3. ВПЛИВ ЕЛЕКТРИЧНОГО ТА МАГНІТНОГО ПОЛІВ НА ЛІНІЙНИЙ ТА НЕЛІНІЙНИЙ КОЕФІЦІЄНТИ ПОГЛИНАННЯ СВІТЛА БАГАТОШАРОВИМИ СФЕРИЧНИМИ КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ 98

3.1. Вплив магнітного поля на коефіцієнт поглинання у багатошаровій сферичній квантовій точці	99
3.1.1. Розв'язок рівняння Шредінгера для електрона у багатошаровій сферичній квантовій точці у магнітному полі.....	99
3.1.2. Чисельний аналіз впливу магнітного поля та розміру квантової точки на енергетичний спектр та коефіцієнт поглинання.....	102
3.2. Вплив однонаправлених електричного та магнітного полів на коефіцієнт поглинання у багатошаровій сферичній квантовій точці	108
3.3. Вплив однонаправлених електричного та магнітного полів на коефіцієнт поглинання у багатошаровій сферичній квантовій точці з донорною домішкою	115
Висновки до розділу 3	122

РОЗДІЛ 4. ВПЛИВ ЗОВНІШНІХ ПОЛІВ НА ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ	
КВАНТОВОЇ ТОЧКИ ЯДРО–ОБОЛОНКА II ТИПУ <i>CdSe/ZnTe</i> ТА	
<i>ZnTe/CdSe</i>	125
4.1. Теоретичне моделювання впливу електричного поля на оптичні	
властивості сферичних квантових точок II типу	126
4.1.1. Рівняння Шредінгера для електрона і дірки та метод його розв’язку	
.....	126
4.1.2. Чисельний аналіз енергетичного спектру і сили осцилятора	
електрона та дірки.....	132
4.2. Теоретичне моделювання впливу магнітного поля на оптичні властивості	
сферичних квантових точок II типу	140
4.2.1. Рівняння Шредінгера для електрона і дірки та метод його розв’язку	
.....	140
4.2.2. Чисельний аналіз енергетичного спектру і міжзонних оптичних	
квантових переходів електрона та дірки.....	143
Висновки до розділу 4	150
ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ І ВИСНОВКИ.....	153
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	157
ДОДАТОК	181

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

КТ – квантова точка;

БСКТ – багатошарова сферична квантова точка;

ПФД – переріз фотоіонізації домішки;

КП – коефіцієнт поглинання;

ХФ – хвильова функція;

КАТ – квантова антиточка;

БСКАТ – багатошарова сферична квантова антиточка.

ВСТУП

Актуальність теми дослідження. Квантові точки (КТ), особливо багаточарові квантові точки (БСКТ), є передовими наноматеріалами, які привертають значну увагу завдяки своїм унікальним оптичним та електронним властивостям. Ці наноструктури здатні обмежувати електрони в трьох вимірах, що призводить до виникнення дискретних рівнів енергії, подібних до тих, що спостерігаються в атомах. Саме цей ефект квантового обмеження забезпечує виняткові та регульовані оптичні властивості КТ. Розуміння того, як зовнішні фактори, такі як електричні і магнітні поля та наявність домішок, змінюють ці властивості, має вирішальне значення для оптимізації КТ для різноманітних високотехнологічних приладів.

Зовнішні поля значно впливають на оптичну поведінку КТ. Вони можуть змінювати енергетичні рівні та просторове утримання носіїв (електронів і дірок) у КТ. Це може викликати штатківські зсуви (зміщення енергетичних рівнів під дією електричних полів) або зеєманівське розщеплення (розщеплення енергетичних рівнів у магнітному полі). Такі явища мають вагомі наслідки для різних застосувань. Наприклад, у фотоелектричних технологіях КТ досліджують для підвищення ефективності поглинання світла та покращення розподілу зарядів у сонячних батареях. Можливість точного налаштування оптичних характеристик за допомогою зовнішніх полів може оптимізувати перетворення сонячної енергії на електричну. В оптоелектронних пристроях, таких як лазери та світлодіоди, зовнішні поля дозволяють регулювати довжину хвилі випромінювання, підвищуючи ефективність і розширюючи функціональні можливості. Крім того, у квантових обчисленнях і сенсорах, зовнішні поля можна використовувати для маніпулювання квантовими станами КТ, що є ключовим аспектом для кубітів у квантових комп'ютерах або для високочутливих детекторів у квантових сенсорах.

Домішки, навмисно введені або утворені внаслідок недоліків у процесі виготовлення, так як і зовнішні поля, відіграють важливу роль у визначенні

оптичних властивостей КТ. Домішки створюють локалізовані стани в КТ, які можуть захоплювати носії заряду, або змінювати енергетичні рівні, впливаючи як на коефіцієнт поглинання, так і на поперечний переріз фотоіонізації. Розуміння впливу домішок є надзвичайно важливим для різних цілей. У контексті очищення матеріалу, зменшення або контроль кількості домішок забезпечує стабільнішу та ефективнішу роботу оптоелектронних пристроїв. Водночас у деяких випадках легування домішками може бути корисним інструментом для розробки приладів з бажаними оптичними властивостями, таких як посилене поглинання в певних діапазонах довжин хвиль або поліпшення рухливості зарядів у матеріалі.

Оптичні властивості КТ, такі як поперечний переріз фотоіонізації та коефіцієнт поглинання, є ключовими параметрами для таких приладів, як сонячні батареї, фотодетектори та світлодіоди. Ці характеристики визначають, як КТ поглинають світло та перетворюють його на електричну енергію, або як вони випромінюють світло під впливом зовнішнього джерела енергії. БСКТ, що складаються з кількох шарів різних напівпровідникових матеріалів, надають можливість налаштовувати оптичні властивості КТ, адаптуючи їх для конкретних приладів шляхом контролю розміру, складу та кількості шарів.

У КТ I типу, де і електрони, і дірки обмежені однією просторовою областю, випромінювальна рекомбінація є дуже інтенсивною, що призводить до посиленого випромінювання світла. Це робить КТ I типу ідеальними для застосувань у світловипромінюючих технологіях. Навпаки, КТ типу II, які відрізняються просторовим розділенням електронів і дірок, характеризуються довшими часами рекомбінації та ширшою регульованою забороненою зоною. Ці властивості роблять КТ II типу дуже привабливими для конкретних застосувань, таких як фотоелектричні пристрої, де просторове розділення носіїв заряду може запобігти рекомбінації. Крім того, КТ II типу можна адаптувати для випромінювання світла в діапазонах з довшими хвилями, таких як інфрачервоне випромінювання, що робить їх корисними для телекомунікацій та біологічних зображень, де важливі глибоке проникнення в тканини або передача сигналів на великі відстані.

Таким чином, дослідження впливу зовнішніх полів і домішок на оптичні властивості БСКТ — як типу I, так і типу II — має величезне значення для розвитку прогресивних технологій у таких галузях, як оптоелектроніка, квантові технології медицині та ін. Розуміння того, як ці фактори впливають на ключові оптичні характеристики, такі як поперечний переріз фотоіонізації та коефіцієнт поглинання, дає змогу створювати матеріали й пристрої, що є ефективнішими, адаптованими та здатними задовольнити зростаючі вимоги сучасних технологій.

Предметом дослідження є енергетичний спектр та хвильові функції (ХФ) електронів та дірок, сили осциляторів міжзонних квантових переходів, КП та поперечний переріз фотоіонізації домішки.

Об'єктом дослідження є багатошарові сферичні квантові точки I та II типу.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами та темами

Результати, які представлені в дисертаційній роботі, отримані в межах наукової тематики кафедри теоретичної фізики та комп'ютерного моделювання Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича «Дослідження спектрів квазічастинок, перенормованих взаємодіями з електромагнітними та квантованими полями в низькорозмірних та 3d системах із метою оптимізації параметрів наноприладів» (номер Держреєстрації 0116U004083). Також робота виконувалася в рамках держбюджетної теми «Квантова теорія електронного тунелювання крізь анізотропні резонансно-тунельні наноструктури квантових каскадних детекторів ближнього інфрачервоного діапазону» (номер Держреєстрації 0121U109823).

Мета дослідження полягає у вивченні впливу електричного і магнітного полів, положення домішки, а також розміру БСКТ на енергетичний спектр, енергію зв'язку, поперечний переріз фотоіонізації домішки та коефіцієнти поглинання в напівпровідникових БСКТ I та II типу.

Завдання, які виконані для досягнення поставленої мети:

1. Дослідити вплив електричних та магнітних полів на енергетичний спектр електрона, енергію електронно-домішкового переходу, енергію зв'язку електрона з

домішкою та локалізацію електрона у БСКТ в односторонніх БСКТ різних розмірів. Розглянути залежність енергетичного спектра електрона у БСКТ $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_yGa_{1-y}As$ з різними ширинами потенціальної ями з домішкою та без неї від процентному вмісту алюмінію в ядрі та у зовнішній оболонці БСКТ.

2. Дослідити вплив зовнішніх електричних та магнітних полів, розміру ядра, ширини потенціальної ями та положення домішки на переріз фотоіонізації домішки (ПДФ) у односторонній БСКТ.

3. Проаналізувати вплив магнітного поля та ширини зовнішньої потенціальної ями на енергетичний спектр, розподіл густини ймовірності електронів, енергію зв'язку електрона з домішкою, коефіцієнт поглинання (КП) та ПДФ в двосторонній БСКТ.

4. Оцінити одночасний вплив співнаправлених електричних та магнітних полів на лінійний, нелінійний та повний КП та проаналізувати залежність КП від розміру БСКТ та домішок з метою оцінки можливості налаштування оптичних властивостей БСКТ для потенційного використання в оптоелектронних пристроях.

5. Вивчити силу осцилятора та поляризованість домішки у БСКТ з різним розміром ядра як функцію електричних і магнітних полів.

6. Дослідити вплив електричних і магнітних полів на енергетичний спектр, розподіл густини ймовірності електронів і дірок та енергії зв'язку екситону у КТ ядро-оболонка II типу.

Методи дослідження

Для дослідження енергетичного спектра та ХФ електронів та дірок під впливом домішок і зовнішніх полів у багатосторонніх наносистемах використовувався матричний метод, який полягає в розкладі ХФ квазічастинок на повний набір ХФ, отриманих як точні розв'язки рівняння Шредінгера в наноструктурі у відсутності домішок та зовнішніх полів. Аналіз виконувався в межах наближення ефективної маси та моделі прямокутних потенціальних бар'єрів, врахуючи умови неперервності ХФ і потоків густини ймовірностей на всіх межах гетероструктури. Для підтвердження результатів додатково був проведений

розрахунок і методом скінченних елементів із використанням комерційного програмного забезпечення COMSOL-Multiphysics.

Наукова новизна результатів, викладених у дисертації, полягає в тому, що вперше:

1. Досліджено одночасний вплив електричного поля та положення донорної домішки на енергетичний спектр електрона, енергію зв'язку електрона з домішкою та ПФД у БСКТ $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ з різною шириною потенціальної ями.

2. Здійснено аналіз одночасного впливу магнітного поля та положення донорної домішки на енергетичний спектр та ХФ електрона, енергію переходу, ПФД та КП у БСКТ $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ з різним радіусом ядра.

3. Теоретично досліджено вплив ширини зовнішньої потенціальної ями на процес тунелювання електрона із зовнішньої потенціальної ями у внутрішню під дією магнітного поля у двоямній БСКТ $GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs$. Показано, що ширина зовнішньої потенціальної ями впливає на плавність процесу тунелювання електрона, що відображається на залежностях КП та ПФД.

4. Досліджено комбінований вплив зовнішніх полів і домішки на енергетичний спектр електрона в БСКТ та проаналізовано особливості ефекту Ааронова-Бома, що призводить до порушення звичайного порядку енергетичних рівнів.

5. Встановлено особливості лінійного та нелінійного КП БСКТ з нецентральною домішкою та без неї, враховуючи різні розміри ядра, які виникають за рахунок комбінованого впливу електричного та магнітного полів.

6. Досліджено вплив зовнішнього електричного поля на КТ II типу $CdSe/ZnTe$ та $ZnTe/CdSe$, яке показало що напруженість електричного поля сприяє просторовому розділенню електрона та дірки, що призводить до зменшення кулонівської взаємодії та збільшення часу життя екситонних станів.

7. Досліджено вплив зовнішнього магнітного поля на КТ II типу $CdSe/ZnTe$ та $ZnTe/CdSe$, у результаті якого виникає ефект Ааронова-Бома. Показано, що

магнітне поле змінює перекриття ХФ електрона та дірки в КТ II типу, що призводить до збільшення кулонівської взаємодії між ними і зростання енергії зв'язку екситону.

Практичне значення отриманих результатів

Розуміння особливостей впливу домішок та зовнішніх полів на енергетичний спектр та ХФ електрона, енергію зв'язку, силу осцилятора, ПДФ та КП у КТ I та II типу дозволяє створювати наносистеми з потрібними оптичними характеристиками для використання у різних оптоелектронних пристроях, таких як сонячні елементи, регульовані джерела світла, фотодетектори та для квантових обчислень.

Вплив зовнішніх полів та домішок на КП БСКТ може бути використаним для керування здатністю матеріалу поглинати світло в певних спектральних діапазонах, що є критично важливим для створення ефективних оптоелектронних пристроїв. Залежність ПДФ домішки від інтенсивності полів та її положення у БСКТ дозволяє визначити умови, за яких значення ПДФ є найбільшим, що робить КТ придатними для застосування в пристроях з високою чутливістю та швидкою реакцією, таких як квантові сенсори, сонячні елементи та фотодетектори. Також можливо визначити умови, за яких значення ПДФ мінімізується, що важливо для пристроїв, де критичним є точність, стабільність і мінімальне поглинання енергії.

Достовірність отриманих результатів обґрунтована застосуванням перевірених теоретичних методів для розв'язання рівняння Шредінгера (таких як матричний метод і метод скінченних елементів), а також їх узгодженістю з результатами, отриманими іншими дослідниками. Додатковим підтвердженням є задовільна збіжність отриманих результатів у граничних випадках з точними розв'язками аналогічних простіших задач.

Особистий внесок здобувача. У [1-2, 4] дисертантка виконувала аналітичні та числові розрахунки енергетичного спектра та ХФ електрона під впливом зовнішнього магнітного поля. У роботах [3, 5] розраховувала енергетичний спектр та ХФ електрона, енергію зв'язку електрона з домішкою та ПДФ та здійснювала

аналіз отриманих результатів. У [7, 9, 14] дисертантка брала активну участь у постановці задач та їх розв'язанні. Виконувала комп'ютерні розрахунки енергетичного спектра електрона, енергії зв'язку електрона з домішкою, сили осцилятора, КП та поляризованості домішки. На основі отриманих результатів підготувала початковий варіант статей. У роботах [6, 8] частково виконувала аналітичні та числові розрахунки та брала участь в обговоренні отриманих результатів. Також брала участь у підготовці матеріалів тез [10-17] та активно представляла результати досліджень на наукових конференціях.

Публікації. Наукові результати, представлені в дисертаційній роботі, опубліковані у 16 працях, з яких 9 статей опубліковано у фахових наукових журналах [1–9], а 7 – у збірниках матеріалів доповідей на міжнародних конференціях [10–16].

Апробація матеріалів дисертації

1. VI Наукова конференція «Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології» (НАНСИС-2019), м. Київ, 4–6 грудня 2019р.
2. X Міжнародна наукова конференція «Релаксаційні, нелінійні, акустооптичні процеси і матеріали» (РНАОПМ-2020), м. Луцьк–Світязь, 25–29 червня 2020р. (онлайн)
3. IV Міжнародна наукова конференція «Актуальні проблеми фундаментальних наук», м. Луцьк–Світязь, 01 – 05 червня 2021р. (онлайн)
4. 9th International Conference «Nanotechnologies and Nanomaterials» (NANO–2021), м. Львів, 25–27 серпня 2021р. (онлайн)
5. 11th International Conference on «Nanomaterials: Applications and Properties» (NAP-2021), м. Одеса, 5-11 вересня 2021р.
6. 10th International research and practice conference «Nanotechnology and Nanomaterials» (NANO–2022), м. Львів, 25–27 серпня 2022р. (онлайн)
7. XI Міжнародна наукова конференція «Релаксаційні, нелінійні, акустооптичні процеси і матеріали» (РНАОПМ-2022), м. Луцьк, 1-5 червня 2022р. (онлайн)

Структура й обсяг дисертації

Дисертація містить анотації двома мовами, перелік умовних позначень, вступ, чотири розділи, основні висновки, список використаних джерел (219 найменувань) та додаток із переліком публікацій автора за темою дисертаційного дослідження.

Загальний обсяг роботи – 185 сторінки та містить 49 рисунки.

РОЗДІЛ 1. АНАЛІЗ ПОПЕРЕДНІХ ДОСЛІДЖЕНЬ ПРОСТИХ, БАГАТОШАРОВИХ СФЕРИЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧОК І ТА ІІ ТИПУ

1.1. Квантові точки «ядро-оболонка» І та ІІ типу

Системи низької розмірності є однією з найактивніших областей досліджень у сучасній фізиці та нанотехнологіях.

Перевагою низькорозмірних систем над матеріалами звичайного масштабу є відмінні оптичні, електричні і магнітні властивості та нові фізико-хімічні характеристики які досягаються за рахунок квантового обмеження. Квантове обмеження це ключовий принцип, що лежить в основі унікальних властивостей та характеристик систем низької розмірності. Коли розмір матеріалу зменшується до масштабу, порівнянного з довжиною хвилі електронів де Бройля, квантові ефекти є домінуючими. Це обмеження призводить до дискретних енергетичних рівнів, зміненої щільності станів і змін електронних властивостей. Вивчення цих характеристик та властивостей важливі для створення нових приладів біомедичної, фізичної та оптоелектроніки.

На основі кількості просторових вимірів, у яких обмежені електрони та дірки, низькорозмірні системи класифікуються на:

- нульвимірні системи (0D) або КТ, де рух електронів та дірок обмежений в усіх трьох просторових напрямках. КТ поводить ся як штучний атом, властивостями якого можна керувати, змінюючи її розмір, легуючи домішкою або ж під впливом зовнішнього магнітного та електричного полів знімається виродження енергетичних станів та зміщення дискретних енергетичних рівнів.

- одновимірні системи (1D) або квантові дроти, де обмеження частинок відбувається у двох просторових напрямках, що дозволяє вільний рух в одному напрямку.

- двовимірні системи (2D) або квантові ями, являють собою структури, в яких обмеження відбувається в одному просторовому вимірі, що дозволяє вільний рух

електронів у двох інших вимірах. Електрони у таких двовимірних системах зазвичай називають двовимірним електронним газом.

Дослідження низькорозмірних систем почалося з розвитком квантової механіки на ще початку 20 століття. Теорію дірок, електронів, фононів, екситонів та їх взаємодії між собою, а також з зовнішніми електричним і магнітним полями у квантових ямах [1-2], квантових дротах [3-4] і КТ [5-6] інтенсивно розробляли починаючи з кінця 20 століття і досягли непоганого якісного і кількісного узгодження з експериментом. Це особливо стосується багаточарових закритих і відкритих систем сферичної та циліндричної симетрій [7-8].

КТ є одними з найбільш досліджених матеріалів, які задовольняють потреби сучасних оптоелектронних приладів, таких як біомітки [9-10], датчики [11-12], лазери [13], світлодіоди [14-16] та медичні прилади [17-19]. Вони являють собою напівпровідникові нанокристали з радіусом, порівняним з борівським радіусом екситона у відповідному матеріалі. В напівпровідниках, коли електрон залишає валентну зону і переходить у зону провідності внаслідок збудження, утворюється пара електрон-дірка. Коли між діркою та електроном існує слабка кулонівська сила притягання, утворюється екситон. Екситони мають природну фізичну відстань між електроном і діркою, яка варіюється залежно від матеріалу, і ця середня відстань називається борівським радіусом екситона $a_{ex} = \frac{\epsilon \hbar^2}{\mu e^2}$. Вона визначається діелектричною проникністю ϵ та приведеною масою μ екситона у даному матеріалі. Розміри масивних напівпровідникових матеріалів значно більші за радіус Бора, і енергетичні рівні є неперервними. Якщо розмір напівпровідника зменшити до розміру порівнянного із борівським радіусом екситона, енергетичні рівні стають дискретними, найнижчий енергетичний рівень електрона стає вище дна зони провідності (для дірки – нижче стелі валентної зони), що призводить до збільшення ефективної ширини забороненої зони, відносно масивних матеріалів. У КТ електрони та дірки знаходяться в обмеженому просторі у всіх трьох напрямках, що призводить до квантування енергетичних рівнів електронів і дірок, тобто

спостерігається ефект нульвимірного обмеження. Електронні властивості цих матеріалів знаходяться між властивостями масивного напівпровідника і дискретних молекул [20].

Основна стратегія створення та збереження квантового обмеження в КТ полягає в тому, щоб інкапсулювати КТ в органічну поверхнево-активну речовину. Таким чином, утворюються КТ типу «ядро-оболонка», які демонструють значно вищі квантові виходи фотолюмінесценції порівняно з простими КТ. Матеріал оболонки зменшує поверхневі дефекти ядра, які зазвичай є центрами безвипромінювальної рекомбінації в простих КТ та посилює обмеження електрона та дірки в ядрі, що призводить до більш яскравого та ефективнішого випромінювання. Оболонка також діє як захисний бар'єр, що захищає ядро від факторів зовнішнього середовища, таких як волога, окислення та інші хімічні реакції, які з часом можуть погіршити властивості КТ. Поміщення КТ в органічну поверхнево-активну речовину призводить до зменшення мерехтіння фотолюмінесценції, за рахунок того, що оболонка допомагає стабілізувати електронне середовище ядра, тим самим зменшуючи ймовірність миготіння та забезпечуючи більш послідовне випромінювання. У КТ «ядро-оболонка» зі збільшенням товщини оболонки спостерігається значний червоний зсув порогової енергії і різке збільшення значення коефіцієнтів нелінійного поглинання та показника заломлення, незалежно від діелектричного середовища [20]. Подібна ситуація також спостерігалася в більшості випадків, коли домішка в КТ «ядро-оболонка» зміщується з центру ядра до центру оболонки.

Залежно від положення валентних зон та зон провідності напівпровідникових матеріалів, з яких вирощена квантова точка, розрізняють КТ «ядро-оболонка» I та II типу, як показано на рисунку 1.1, де V_{VB} та V_{CB} межі валентної зони та зони провідності а E_g - енергія забороненої зони [21].

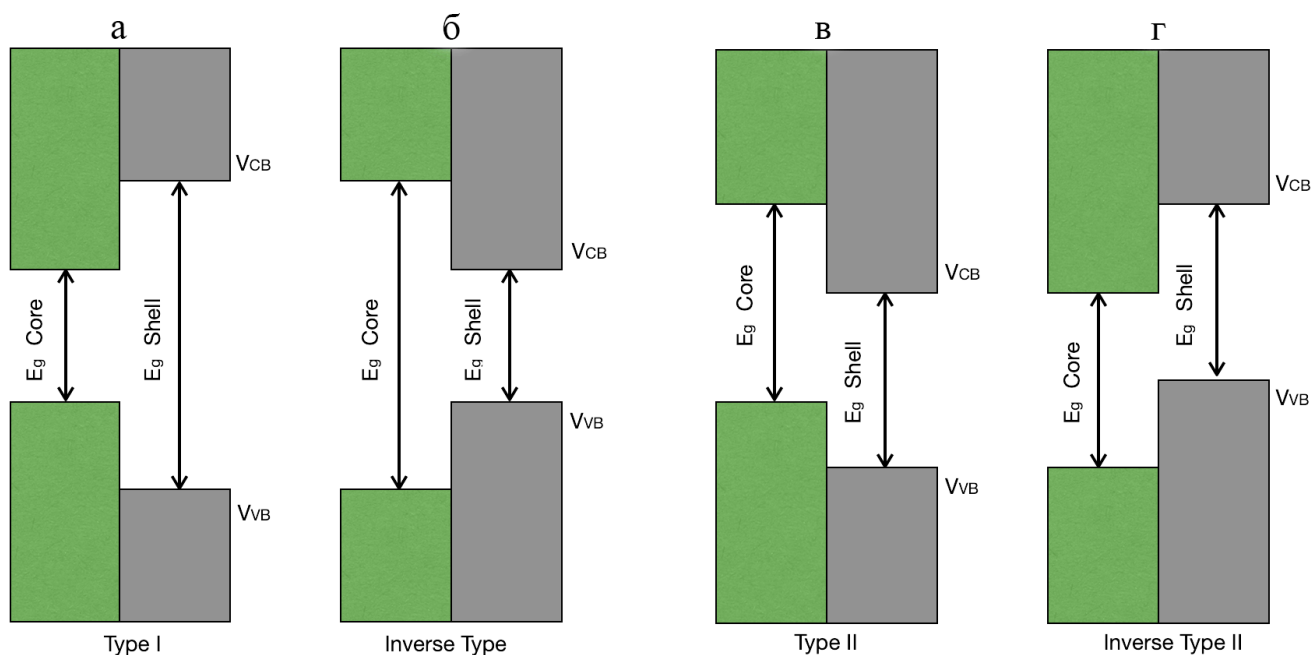


Рисунок 1.1. Енергетичне представлення КТ «ядро-оболонка» I та II типу.

У КТ «ядро-оболонка» I типу заборонена зона оболонки більша за заборонену зону ядра, таким чином забезпечується повне обмеження носіїв заряду в області ядра (рисунок 1.1а). Для оберненої КТ «ядро-оболонка» I типу навпаки, заборонена зона оболонки менша, ніж заборонена зона ядра, тому носії заряду частково або повністю обмежені в оболонці, залежно від її розмірів (рисунок 1.1б). У КТ «ядро-оболонка» II типу (рисунок 1.1в) межі V_{VB} і V_{CB} оболонки менші, ніж межі V_{VB} і V_{CB} ядра. Тому електрони та дірки обмежені областю оболонки та областю ядра відповідно. Для інверсних КТ «ядро-оболонка» II типу (рисунок 1.1г) V_{VB} і V_{CB} матеріалів оболонки більші, ніж V_{VB} і V_{CB} матеріалів ядра. У цьому випадку, електрони та дірки в основному обмежені областю ядра та областю оболонки відповідно.

Оскільки КТ ядро-оболонка типу I та типу II мають свої унікальні переваги, вибір між ними залежить від конкретних вимог використання. КТ I типу ідеально підходять для приладів, які вимагають високої ефективності фотолюмінесценції, стабільності та вузьких спектрів випромінювання, таких як фотодетектори та

світлодіоди. Тоді як, КТ II типу використовуються в приладах, які мають перевагу від просторового розділення зарядів. Наприклад, в сонячних елементах це зменшує ймовірність оберненої рекомбінації зарядів і внаслідок цього збільшує їх ККД. Розуміння відмінностей між цими двома типами КТ типу «ядро-оболонка» дозволяє оптимально вибирати КТ, адаптовані до відповідних оптоелектронних приладів.

1.2. Методи вирощування квантових точок

КТ — це наночастинки з унікальними властивостями, що впливають із ефектів квантового обмеження. Ці властивості значною мірою залежать від розміру, форми та матеріалу поверхні КТ, які контролюються під час їх синтезу. Протягом багатьох років розроблялись різні методи вирощування високоякісних КТ, кожен зі своїми перевагами та недоліками.

Квантові точки можуть бути синтезовані двома способами: «зверху-вниз» та «знизу-вгору» [22]. У випадку підходу «зверху-вниз», за допомогою фізичних і хімічних процесів, об'ємний матеріал ретельно подрібнюється до дуже дрібних розмірів, що знаходяться в нанодіапазоні. Основні методи в цій категорії включають літографію [23-25], травлення, механічне фрезування [26], скануючу зондову мікроскопію та лазерну абляцію [27-28].

Одним з найбільш поширених методів виготовлення наночастинок є літографія, який полягає у використанні світлової, електронної або іонної радіації для створення візерунків на поверхні матеріалу, який потім обробляється іншими способами для отримання наноструктур з високоточним контролем розмірів та форми. Механічне фрезерування та травлення полягає в отриманні наноструктур шляхом фізичного та хімічного видалення матеріалу з поверхні. Сканувальна зондова мікроскопія є сукупністю методів мікроскопії, які використовують гострий зонд для дослідження поверхні матеріалу з надзвичайно високою роздільною здатністю, аж до атомарного рівня. Основний принцип даного методу полягає в

тому, що зонд сканує поверхню зразка, де для отримання зображень і даних про топографію, хімічний склад, механічні властивості та інші характеристики матеріалу використовують різні види взаємодій між зондом і поверхнею матеріалу.

Метод «знизу-вверх» передбачає послідовне складання атомів і молекул в необхідному порядку у наноструктури з відповідними властивостями. Методи створення наночастинок за принципом «знизу-вверх» ґрунтуються на хімічних реакціях і процесах самоскладання, що дозволяє отримати квантові точки відповідного розміру, складу та властивостей поверхні. Основні методи в цій категорії включають самоскладання, молекулярно-променевою епітаксію, хімічне осадження з газової фази, золь-гель синтез і колоїдний синтез.

Метод самоскладання полягає в природній тенденції атомів, молекул або наночастинок спонтанно організовуватися в чітко визначені структури через нековалентні взаємодії, такі як сили Ван-дер-Ваальса, водневі зв'язки, електростатичні взаємодії та гідрофобні ефекти. Самоскладання відбувається за рахунок мінімізації вільної енергії системи, що передбачає спонтанну організацію окремих компонентів у стабільні низькоенергетичні конфігурації.

Молекулярно-променевою епітаксія — це метод, який полягає в осадженні тонких шарів матеріалів на підкладку в умовах надвисокого вакууму, що забезпечує високу чистоту і контроль над процесом зростання наноструктур на атомарному рівні.

Процес молекулярно-променевої епітаксії можна розділити на кілька етапів: підготовка, зародження, ріст та моніторинг у реальному часі. На підготовчому етапі підкладка, як правило, напівпровідникова пластина, ретельно очищається, щоб видалити будь-які забруднення, які можуть вплинути на якість квантових точок. Потім підкладку поміщають у середовище надвисокого вакууму, щоб мінімізувати забруднення залишковими газами. На етапі зародження джерела матеріалів нагріваються, що призводить до їх випаровування та утворення атомних або молекулярних пучків. Ці пучки спрямовуються на підкладку, де відбувається осадження матеріалу та формування епітаксійних шарів. Слід зазначити, що цей

процес є вирішальним, оскільки він відповідає за щільність і однорідність КТ. Однією з ключових переваг молекулярно-променевої епітаксії є здатність отримання високоякісних кристалічних структур із мінімальною кількістю дефектів. Завдяки умовам надвисокого вакууму та високому контролю за процесом, вдається уникнути забруднень та небажаних домішок. Це особливо важливо при створенні складних гетероструктур, де навіть невеликі дефекти можуть суттєво впливати на властивості матеріалу.

Метод хімічного осадження з парової фази полягає в отриманні наночастинок шляхом осадження матеріалу з газової фази на підкладку. Процес хімічного осадження починається з поміщення ретельно очищеної від забруднень підкладки у реактор з контрольованою температурою та тиском. Потім у реактор поміщують газоподібні прекурсори, які містять необхідні елементи для майбутніх наноструктур. На поверхні підкладки відбувається хімічна реакція між газоподібними прекурсорами, що призводить до осадження атомів та формування кристалічного шару. Цей процес може бути ретельно контрольованим шляхом регулювання тиску, температури, складу газової суміші та швидкості потоку газів, що дозволяє отримувати шари із заданою товщиною, складом та структурою. Ключовою перевагою методу хімічного осадження з парової фази є можливість отримання високоякісних наноструктур з мінімальною кількістю дефектів.

Колоїдний синтез [29-33] є одним із найбільш поширених і універсальних методів отримання КТ. Цей метод заснований на хімічних реакціях у розчині, в результаті яких формуються наночастинки з контрольованими розмірами та властивостями. Процес колоїдного синтезу можна поділити на три основні етапи: нуклеація, зростання та стабілізація.

Під час нуклеації за високої температури з прекурсорів утворюються невеликі кластери атомів або молекул. На стадії росту додаткові атоми або молекули приєднуються до існуючих ядер, збільшуючи розмір нанокристалів. Швидкість зростання та кінцевий розмір КТ залежать від температури [34-35], концентрації прекурсорів та стабілізаторів. Зазвичай процес зростання триває за

більш низької температури для запобігання агрегації та подальшого збільшення розміру нанокристалів. Нарешті, стабілізація передбачає використання поверхнево-активних речовин для запобігання агломерації нанокристалів і зменшення поверхневих дефектів КТ, покращуючи їхні оптичні властивості та стабільність.

Цей метод має кілька важливих переваг. По-перше, він дозволяє отримувати квантові точки з високим ступенем однорідності, що критично важливо для їх оптичних та електронних властивостей. По-друге, метод може масштабуватися для масового виробництва, що робить його придатним для комерційних застосувань.

Колоїдний синтез також дозволяє створювати квантові точки різних розмірів та форми [34-35] з додаванням домішок [36], що відкриває широкі можливості для модифікації їх властивостей та використання в різних галузях.

1.3. Практичне використання квантових точок

КТ – це нанорозмірні напівпровідникові частинки, що мають унікальні оптичні та електронні властивості завдяки своїм квантово-механічним характеристикам. Ці частинки є перспективними матеріалами для оптоелектроніки нового покоління у різних галузях, таких як технології відображення [37-40], фотоенергії та сонячній енергії [41-43], освітленні, біомедицині [44-45], сенсорах [46-49], фотоніці [50-52], квантових обчисленнях [53-55], освітленні, екології і, навіть, в агрикультурі.

У технологіях відображення особливу увагу приділяють дисплеям з КТ, які підвищують точність кольору, яскравість та енергоефективність, випромінюючи чисті, насичені кольори під час підсвічування джерелом світла. Зазвичай джерелом світла виступають сині світлодіоди, оскільки вони енергоефективні та забезпечують необхідну довжину хвилі для збудження КТ. Коли синє світло проходить крізь шар КТ, частина синього світла перетворюється на червоне та зелене, залежно від їх розміру. Це створює повний спектр кольорів (червоний,

зелений, синій), які потім поєднуються для отримання яскравих та високоякісних зображень [39].

У сонячній енергетиці одним з найперспективніших застосувань квантових точок є сонячні елементи на їх основі. За рахунок того, що традиційні кремнієві сонячні елементи мають фіксовану ширину забороненої зони, вони поглинають лише певну частину сонячного спектра, що негативно позначається на ефективності перетворення енергії. На відміну від них, ширину забороненої зони квантових точок можна регулювати, змінюючи їхній розмір, що дозволяє їм поглинати світло в ширшому діапазоні довжин хвиль. Ця властивість дає змогу сонячним елементам на основі КТ ефективно використовувати більшу частину сонячного спектра.

З використанням КТ можна створити багатошарові сонячні елементи, де кожен шар оптимізується для поглинання різних ділянок спектра сонячного світла. Це дозволяє ефективніше використовувати енергію, порівняно з традиційними технологіями. Цей підхід розглядається як шлях до перевищення межі Шоклі-Квейссера, яка визначає максимальну теоретичну ефективність сонячного елемента з одним р-n-переходом. Завдяки постійним зусиллям дослідників, коефіцієнт перетворення енергії сонячних елементів на основі КТ значно покращився. Він зріс з 0,12% до 18,1%, що робить ці елементи конкурентоспроможними з сонячними елементами на органічних барвниках, які також мають високий показник ефективності [56].

Використання КТ у медицині відкриває нові перспективи для діагностики, лікування та моніторингу здоров'я. Одним із ключових напрямків є флуоресцентна візуалізація, оскільки КТ мають високу яскравість і стійкість до мерехтіння, що робить їх ідеальними для відстеження й маркування клітин і молекул в організмі. Це сприяє точнішій діагностиці та детальнішому вивченню різних захворювань. Крім того, завдяки змінним спектральним характеристикам, квантові точки дозволяють виявити специфічні біомаркери та діагностувати хвороби на ранніх стадіях з високою точністю. Наприклад, КТ можуть ефективно виявити ракові

клітини або інфекційні агенти. Ще одним перспективним напрямком є таргетна терапія, коли модифіковані КТ використовуються для доставки ліків безпосередньо до клітин. Це знижує побічні ефекти і підвищує ефективність лікування, дозволяючи сконцентрувати терапевтичний ефект саме на уражених тканинах.

КТ відграють важливу роль в розвитку квантових обчислень, в основі яких стоїть використання принципів квантової механіки, які недоступні класичним комп'ютерам. Завдяки своїм унікальним квантово-механічним властивостям, КТ добре підходять для використання в якості будівельних блоків квантових комп'ютерів, зокрема кубітів. У квантових обчисленнях кубіти — це основні одиниці квантової інформації, на відміну від класичних обчислень, де використовуються біти. Якщо класичний біт може мати тільки два стани (1 або 0), то кубіт здатний перебувати в стані суперпозиції — тобто одночасно в обох станах. Ця властивість дозволяє квантовим комп'ютерам виконувати велику кількість обчислень одночасно, що значно прискорює вирішення складних задач порівняно з класичними комп'ютерами. Завдяки своїй сумісності з напівпровідниковими технологіями, КТ можна легко інтегрувати у вже існуючі структури, що дозволяє створювати пристрої для квантових обчислювань, які потенційно можна масштабувати. КТ дає можливість управління та зчитування станів кубітів за допомогою оптичних методів, наприклад закодована інформація зчитується за допомогою лазерів. Однією з переваг КТ є те, що незалежно від відстані, вони можуть взаємодіяти через механізми, такі як тунелювання, що дозволяє здійснювати квантові операції, які потребують взаємодії кількох кубітів. Ключовим аспектом у квантових обчисленнях є час когерентності кубіта — тривалість часу, протягом якої кубіт зберігає свій квантовий стан. КТ забезпечують відносно тривалий час когерентності, що є критично важливим для виконання надійних квантових обчислень до того, як квантовий стан буде втрачено через декогерентність.

За рахунок того, що міняючи розмір КТ можна досягнути випромінювання з

різною довжиною хвилі, а відповідно і точно контролювати колір випромінюваного світла, вони є ідеальними для використання в різних світловипромінюючих пристроях. Серед цих пристроїв одним з найбільш затребуваних є лазери. В порівнянні з традиційними лазерами, лазери на основі КТ мають низькі порогові значення для генерації лазерного випромінювання, що робить їх більш енергоефективними та дозволяє використовувати їх у компактних пристроях. Окрім того, через високу стійкість до мерехтіння, лазери на основі квантових точок відрізняються довговічністю і стабільністю роботи, що є важливим для пристроїв, які працюють в умовах інтенсивної експлуатації. За рахунок можливості керувати розміром і складом КТ можна створювати лазери, які випромінюють світло на декількох довжинах хвиль одночасно. Це відкриває нові перспективи для застосування КТ в оптоелектроніці та лазерних технологіях.

КТ знаходять широке застосування в розробці різного виду сенсорів, включаючи оптичні, хімічні та біологічні сенсори. В оптичних сенсорах КТ зазвичай діють як флуоресцентні зонди, випромінюючи світло під впливом зовнішнього джерела світла, такого як лазер або світлодіод. Під час взаємодії з певними аналітами, властивості флуоресценції КТ можуть змінюватись. Аналіз цих змін дозволяє визначити наявність або концентрацію аналіта. У хімічних сенсорах КТ використовуються для виявлення різних речовин. Наприклад, газові сенсори на основі КТ здатні з високою чутливістю виявляти гази, такі як кисень, вуглекислий газ чи аміак. Взаємодія цих газів із поверхнею КТ змінює їхні оптичні або електричні властивості, такі як флуоресценція чи провідність. Аналіз цих змін дозволяють точно визначити концентрацію газу в середовищі. Подібний до газових сенсорів принцип роботи мають і іонні сенсори, які використовують для виявлення іонів металів у розчині, таких як свинець, ртуть або кадмій. Ці іони, взаємодіючи з поверхнею КТ, призводить до гасіння або посилення флуоресценції, в залежності від їх концентрації у розчині. В біосенсорах КТ використовуються для виявлення біомолекул, таких як білки, нуклеїнові кислоти та інші важливі біомаркери, оскільки, за рахунок їх високої чутливості, можна виявляти навіть малі

концентрації речовин, що є особливо важливим для ранньої діагностики захворювань.

1.4. Методи та підходи для теоретичного обчислення спектрів квазічастинок у квантових точках

Для теоретичних досліджень властивостей наноструктур використовуються різні підходи. Одним з перших є мікроскопічний підхід, який полягає у врахуванні положення кожного атома наносистеми і придатний для опису як неорганічних, так і органічних наноструктур [57]. Незважаючи на те, що вчені використовують різні спрощення в рамках цього підходу [58-60], він залишається доволі складним. У зв'язку з цим, на даний момент переважно застосовують макроскопічний підхід, який не враховує атомну структуру системи і ґрунтується на використанні методу огибаючих функцій та макроскопічних параметрах, таких як ефективна маса та діелектрична проникність напівпровідникових матеріалів, з яких складається наносистема. Точність розрахунків для енергій міжзонних квантових переходів, виконаних за допомогою макроскопічного методу, підтверджується їх відповідністю експериментальним даним для КТ різних матеріалів та розмірів [61].

Зонний розрив напівпровідників математично описується за допомогою обмежуючого потенціалу, який може мати різні форми. Наприклад, у роботі [62] розглядається система з степенево-експоненційним потенціалом, який має вигляд $V(r) = V_0[1 - \exp(-r^p/R^p)]$, де R – радіус КТ та V_0 – висота потенціального бар'єра, у роботах [223-224] розглядається система з плавним потенціалом $V(r) = V_0/2[1 + \tanh(r - R/L)]$, де L – товщина «перехідного» шару між КТ та матрицею. Частіше використовується параболічний потенціал [63-68] $V(r) = \alpha r^2$, де α – параметр крутизни утримуючого потенціалу, та прямокутний потенціал [69], оскільки для цих потенціалів існують точні розв'язки рівняння Шредінгера.

У роботі [70] для вивчення властивостей БСКТ використовують наближення ефективних мас і модель прямокутних потенціальних ям та бар'єрів. На основі цих

наближень, для кожного шару наноструктури рівняння Шредінгера для радіальної ХФ розділяється на окремі рівняння. Використовуючи неперервність ХФ та густини потоку її ймовірності на межах поділу наноструктури, умов скінченності ХФ в центрі КТ та на безмежності і умови нормування отримуються невідомі коефіцієнти в ХФ та дисперсійне рівняння.

Дослідження [6] є одним з перших, в якому вивчено властивості БСКТ та проведено порівняння теоретичних результатів з експериментальними. У роботі показано, що розрахунки енергії міжзонних квантових переходів між основними станами квазічастинок, які виконані в рамках наближення ефективної маси та моделі прямокутних потенціалів, добре узгоджуються з експериментальними даними, навіть для шарів наноструктури товщиною всього 1-2 постійних ґратки.

Результати робіт [71-72] підтверджують доцільність використання наближення ефективних мас і моделі прямокутних потенціалів для складних наносистем. У цих дослідженнях було розраховано енергетичний спектр електронів у квантових кільцях *AlGaAs/GaAs* розміром 2 – 4 нм, де отримані результати добре співпадають з експериментальними даними. Дана модель розрахунку спектрів квазічастинок також апробована на складних квантових дротах [7] та багатошарових квантових плівках [73]. Таким чином, наближення ефективних мас і прямокутних потенціалів виступають базовими теоретичними підходами, які можуть бути використані для розв'язання рівняння Шредінгера, щоб отримати спектральні характеристики простих і багатошарових наносистем. Саме ці наближення були використані для теоретичних досліджень, представлених у дисертації.

Під впливом зовнішніх полів та нецентральної домішки сферична симетрія задачі порушується і рівняння Шредінгера не розв'язується точно. У цьому випадку використовуються наближені методи. Найпоширенішими є метод теорії збурень і варіаційний метод. У випадку теорії збурень гамільтоніан H системи має вигляд

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V} \quad (1.1)$$

де $\hat{H}_0$ – гамільтоніан «незбуреної» системи (описує просту систему, для якої відомі точні рішення), $\hat{V}$ – це збурення, яке вважається малим порівняно з $\hat{H}_0$, і λ – параметр вмикання взаємодії.

Основна ідея методу полягає у представленні енергії та ХФ системи у вигляді розкладу в ряд:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (1.2)$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \dots \quad (1.3)$$

Метод теорії збурень добре працює для систем де збурення є малим порівняно з гамільтоніаном $\hat{H}_0$.

Варіаційний метод базується на основі мінімуму енергії, згідно якого енергія основного стану менша або дорівнює середньому значенню енергії, отриманому з використанням пробної хвильової функції $\psi(\vec{r}; \alpha)$, яка може залежати від одного до кількох параметрів α .

Середнє значення енергії для обраної ХФ обчислюється за формулою

$$E(\alpha) = \frac{\int \psi^*(\vec{r}; \alpha) \hat{H} \psi(\vec{r}; \alpha) d\vec{r}}{\int \psi^*(\vec{r}; \alpha) \psi(\vec{r}; \alpha) d\vec{r}} \quad (1.4)$$

За рахунок того, що ХФ є наближеною, отримане значення енергії завжди буде вищим або рівним точному значенню енергії основного стану. Похибку можна зменшити за допомогою вдосконалення пробної функції.

Слід зазначити, що метод теорії збурень та варіаційний метод не завжди добре підходять для розв'язання рівняння Шредінгера. Наприклад, у методі теорії збурень важливо, щоб потенціал збурення був відносно малим порівняно з Гамільтоніаном незбуреної системи. Якщо збурення значне, то необхідно враховувати поправки вищого порядку і ряд розкладу може не сходитися. Точність варіаційного методу значною мірою залежить від вибору пробної хвильової функції, що часто потребує інтуїції, досвіду та додаткових розрахунків. Цей метод

менш ефективний для збуджених станів і зазвичай дозволяє отримати лише енергії основного та перших збуджених рівнів. Однак, при врахуванні впливу домішок і зовнішніх полів, де симетрія задачі порушується і неможливо точно розв'язати рівняння Шредінгера, внесок збуджених станів на формування оптичних властивостей наноситеми зростає. Тому доводиться застосовувати числові методи для розв'язку рівняння Шредінгера, зокрема: матричний метод, метод дискретних змінних, метод скінченних елементів, В-сплайн метод, спектральний метод, наближення Гартрі-Фока та інші.

У дисертації для розв'язку рівняння Шредінгера використовується матричний метод та метод скінченних елементів.

При використанні матричного методу, щоб отримати енергетичний спектр електрона, використовується розклад ХФ по повному набору ХФ електрона в сферичній КТ без впливу зовнішніх полів та домішки

$$\Psi_{jm}(\vec{r}) = \sum_n \sum_l c_{nl}^{jm} \Phi_{nlm}(\vec{r}), \quad (1.5)$$

Тут $\Phi_{nlm}(\vec{r})$ отримані як точні розв'язки рівняння Шредінгера і, з врахуванням сферичної симетрії, записується у вигляді

$$\Phi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (1.6)$$

де $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ – сферичні функції, $R_{nl}(r)$ - радіальна частина ХФ.

Основна ідея методу скінченних елементів полягає в тому, щоб розбити область простору на малі підобласті – скінченні елементи. На кожному елементі хвильова функція апроксимується набором простих базисних функцій. Оригінальне рівняння Шредінгера перетворюється в слабку форму, що дозволяє замість точного виконання рівняння у кожній точці задовольняти його в інтегральному вигляді по всіх елементах. Після визначення локальних матриць для кожного елемента їх об'єднують у глобальну систему рівнянь. Ця система розв'язується чисельними методами, що дозволяє знайти значення ХФ в вузлах

сітки. Використовуючи знайдені вузлові значення і базисні функції, будується апроксимація ХФ по всьому простору.

1.5. Домішка в квантових точках

Одним із методів зміни електричних, магнітних і оптичних властивостей КТ є легування донорними або акцепторними домішками. Донорна домішка — це атом, який має більше валентних електронів, ніж атоми основного матеріалу. Коли такі атоми включаються до складу КТ, вони віддають додаткові електрони, збільшуючи кількість вільних електронів у зоні провідності напівпровідника. Це створює напівпровідник n-типу, де основними носіями заряду є негативно заряджені електрони. Акцепторна домішка, навпаки, — це атом, який має менше валентних електронів, ніж атоми основного матеріалу напівпровідника. При включенні в КТ такі атоми приймають електрони, залишаючи дірки у валентній зоні, що створює напівпровідник р-типу, де основними носіями заряду є позитивно заряджені дірки. Легування домішками значно впливає на поведінку КТ. Присутність домішок може призводити до зміщення спектрів поглинання та випромінювання КТ, змінюючи їх колір і яскравість. Така можливість налаштовувати оптичні властивості є особливо важливою для оптоелектронних пристроїв, таких як світлодіоди, сонячні елементи чи лазери, де потрібні певні довжини хвиль для випромінювання або поглинання.

За значенням енергії іонізації домішки поділяються на мілкі та глибокі. Якщо енергія іонізації домішки близька до країв зони провідності або валентної зони (близько 0,1–0,05 eV), то таку домішку називають мілкою або воднеподібною через схожість енергетичного спектру зі спектром атома водню. Такі домішки можуть легко іонізуватися, створюючи вільні носії заряду (електрони або дірки) при відносно низьких температурах. Мілкі домішки зазвичай використовуються для легування напівпровідників, щоб збільшити концентрацію вільних носіїв заряду і, відповідно, змінити провідність матеріалу. Глибокими називають домішки, енергія

іонізації яких близька до половини ширини забороненої зони. Для їх іонізації потрібна більша енергія, ніж для мілких домішок. Завдяки високій енергії іонізації такі домішки забезпечують стабільність властивостей матеріалу при високих температурах або інших екстремальних умовах. Це робить їх важливими для створення матеріалів, здатних зберігати свої характеристики під час експлуатації у складних умовах.

На сьогодні дослідження впливу домішок на такі оптичні параметри КТ, як енергія і сила осциляторів квантових переходів [74-75] квазічастинок, енергія зв'язку, коефіцієнти поглинання [66-67] і поперечний переріз фотоіонізації [76-77] притягує увагу і теоретиків і експериментаторів [78].

Дослідження домішкових станів у напівпровідникових наноструктурах було розпочато ще на початку 1980-х років [79]. За рахунок зростання інтересу до теми легування, використовуючи метод теорії збурень [80-82], варіаційні підходи [77, 83-90], числові методи, в тому числі метод скінченних елементів [91-93], метод Рунге-Кутта [94], метод стрільби [95-96], метод розкладу хвильової функції [97-100], метод трансформації потенціала [101] почались дослідження впливу мілких домішок на КТ.

Використовуючи метод теорії збурень, у [80, 82] розраховано енергію зв'язку основного стану для неглибокої водневоподібної домішки в сферичній КТ *GaAs* з параболічним профілем потенціалу. Результати обчислень показали, що для конкретного положення домішки, енергія зв'язку зменшується зі збільшенням радіуса КТ. Подібна поведінка спостерігається при віддаленні домішки від центру КТ. У [77] автори варіаційним методом теоретично дослідили вплив гідростатичного тиску на енергію зв'язку та поперечний переріз фотоіонізації домішки. Використовуючи цей ж метод, у [102-103] було досліджено одночасний вплив домішки та магнітного поля на властивості БСКТ. Показано, що коефіцієнт оптичного поглинання та значення показника заломлення зміщуються в область вищих енергій зі збільшенням значення прикладеного магнітного поля, особливо для КТ з більшою оболонкою. За допомогою варіаційного методу Рітца у [104-105]

вивчали, як напруженість та напрямок електричного поля впливають на енергію зв'язку електрона з нецентральною домішкою у сферичній КТ і квантовому диску відповідно. Було виявлено, що енергія зв'язку досягає максимуму, коли домішка знаходиться в центрі наносистеми, але однорідне електричне поле її зменшує. У роботі [106] варіаційним методом Рітца розглянуто вплив домішок на оптоелектричні властивості КТ II типу.

Автори [107] провели порівняння значень енергії зв'язку центральної мілкої водневоподібної домішки у сферичній КТ $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$, обчисленої за допомогою моделі прямокутних потенціалів, використовуючи варіаційний метод і метод теорії збурень. Було показано якісну відповідність результатів, отриманих цими методами. Встановлено, що при скінченному потенціальному бар'єрі енергія зв'язку електрона з донорною домішкою має немонотонну залежність від радіуса квантової точки. У дослідженні [108], використовуючи варіаційний метод і модифіковану теорію збурень, проаналізували вплив нецентральної донорної домішки на основний та два збуджені стани електрона в КТ зі скінченим потенціальним бар'єром.

При легуванні КТ акцепторною домішкою спостерігається зміщення смуг поглинання у високоенергетичну область [109]. У [99] проаналізовано вплив розташування акцепторної домішки на енергетичні рівні дірки, силу осцилятора та коефіцієнт поглинання і показано, що зміщення домішки від центру квантової точки призводить до зміщення піку поглинання в низькоенергетичну частину спектра.

Коли діелектричні властивості матеріалів КТ та її оточення сильно відрізняються, важливу роль відіграють поляризаційні ефекти. У роботі [88] вивчався вплив цих поляризаційних зарядів на оптичні властивості КТ з нецентральною донорною домішкою. Вплив поляризаційних зарядів враховували, додаючи до рівняння Шредінгера додатковий член, отриманий на основі розв'язку рівняння Пуассона. Було встановлено, що різниця в діелектричних проникностях шарів наносистеми, коли домішка розташована близько до центру КТ, призводить

до незначного зсуву піку поглинання в низькоенергетичну область, і до зсуву в сторону вищих енергій, коли домішка знаходиться поблизу границі КТ або за її межами.

Як було зазначено вище, у випадку великого збурення системи метод теорії збурень та варіаційний метод не завжди добре підходять для розв'язання рівняння Шредінгера, тому доводиться використовувати числові методи. У [97] матричним методом досліджено вплив магнітного поля і донорної домішки на сферичну КТ. Було показано, що в КТ з центральною домішкою під впливом магнітного поля спостерігається ефект Ааронова-Бома. В роботі [110] також матричним методом було досліджено одночасний вплив центральної водневоподібної домішки і зовнішніх полів на нелінійно-оптичні властивості БСКТ. Хвильові функції в цьому методі шукають у вигляді розкладу за повним набором точних розв'язків рівняння Шредінгера, отриманих для електрона в КТ за відсутності зовнішніх полів і домішок. Цей метод дозволяє встановити внески електронних станів із певними значеннями орбітального квантового числа в утворення нових станів під час збурення, яке порушує сферичну симетрію задачі. Точність методу забезпечується кількістю доданків у розкладі ХФ. Згідно з роботою [69], у разі відсутності домішки кількість доданків у розкладі ХФ становить близько 20. Однак, у випадку наявності домішки, яка створює сингулярний потенціал [97], для підтримання високої точності обчислень, кількість доданків збільшується до 60.

У [91] методом скінченних елементів досліджено вплив електричного поля на еліптичну КТ ZnS/CdSe. Розглянуто залежність енергетичного спектру, енергії зв'язку та поляризації електрона від напруженості електричного поля, положення домішки та розмірів КТ. Показано, що поляризація домішки в еліптичній КТ є в 4 рази більшою, ніж у подібній сферичній КТ.

Наявність двох домішок у КТ [111-112] представляє більш складний сценарій, ніж випадок з однією домішкою. Взаємодія між домішками, а також їхній сукупний вплив на електронні, оптичні та магнітні властивості КТ може призводити до різноманітних ефектів, які залежать від таких факторів, як тип

домішок, їхнє просторове розділення та їх відносні позиції всередині КТ. У дослідженні [111, 174] автори вивчили властивості електрона в КТ з двома діаметрально розташованими іонами водневоподібної домішки та отримали коефіцієнт лінійного поглинання й зміни показників заломлення як функції енергії фотона, розміру КТ і розташування домішок. Виявлено, що зі збільшенням відстані між домішками смуги поглинання зміщуються у високоенергетичну область.

Розглянуті попередні роботи доводять що вплив домішок на КТ є актуальною темою для досліджень. Особливу увагу слід приділити нецентральним домішкам в БСКТ.

1.6. Вплив електричного та магнітного полів на оптичні властивості квантових точок

Сучасні технології дозволяють створювати КТ зі складними структурами, такими як ядро-оболонка, ядро-оболонка-оболонка, квантова точка-квантова яма та інші. Розвиток нанотехнологій стимулює більш детальне теоретичне вивчення властивостей цих наносистем і пошук методів керування ними за допомогою зовнішніх полів. Ці поля можуть контролювати поведінку носіїв заряду всередині наноструктури, що, у свою чергу, дозволяє суттєво змінювати їх рівні енергії, хвильові функції та інші властивості. Розуміння того, як наночастинки реагують на електричні та магнітні поля, має вирішальне значення для розробки та оптимізації приладів [113-125], які використовують ці нанорозмірні структури.

При прикладанні електричного поля до наноструктури спостерігається квантово-розмірний ефект Штарка [126], який проявляється у зміщенні та розщепленні енергетичних рівнів носіїв заряду. Коли КТ поміщають в електричне поле, електронні рівні зсуваються до нижчих значень енергії, а діркові — до вищих, що призводить до зменшення енергії поглинання та випромінювання системи. Також електричне поле викликає нахил валентної зони та зони провідності, що призводить до просторового розділення зарядів і, як наслідок, зменшення інтегралу

перекриття та коефіцієнтів поглинання та випромінювання. Ефект Штарка був проаналізований у різних наноструктурах, включаючи КТ [127-131] та квантові дроти [132]. Подібно до електричних полів, магнітні поля також мають суттєвий вплив на наночастинки. Під дією магнітного поля спостерігається ефект Зеемана [66, 133-137], який проявляється у розщепленні енергетичних рівнів носіїв заряду. Це розщеплення відбувається через взаємодію між магнітним полем і магнітним моментом електронів у наночастинці. У присутності магнітного поля $\vec{B}$ електрон з магнітним моментом $\vec{\mu}$ набуває додаткової енергії $\Delta E = -\vec{\mu}\vec{B}$. Набута енергія призводить до зняття виродження атомних станів за повним квантовим числом та розщепленню атомних спектральних ліній.

У присутності зовнішніх полів сферична симетрія задачі порушується, і рівняння Шредінгера не може бути точно розв'язане. Тому більшість досліджень впливу електричного [138-153] або магнітного [133, 154-169] полів на енергетичний спектр та оптичні властивості КТ виконується за допомогою варіаційного методу [138-139, 154-160], методу теорії збурень [139-142, 169] або числовими методами.

В [159] за допомогою варіаційного методу в межах наближення ефективної маси та нескінченно глибокого потенціального бар'єру було досліджено енергію зв'язку основного стану водневоподібного мілкового донора в БСКТ *GaN/InGaN/GaN*. Отримані результати показують, що енергія зв'язку нелінійно зростає зі зростанням магнітного поля. Ефект магнітного поля більший при ширшій оболонці і коли домішка розташована в центрі КТ. Для дослідження впливу магнітного поля на наносистеми у [66-70, 163-165] використано метод прямої матричної діагоналізації, у якому електронні хвильові функції розкладаються на різні ортонормовані базиси в межах різних моделей потенціалу КТ. Автори в [69] розклали ХФ на орбіталі слейтерівського типу та розраховували вплив магнітного поля на квантові переходи електрона в простій КТ із жорсткими стінками. У роботах [68, 163] описано, як магнітне поле впливає на КП та енергію зв'язку електрона з домішкою в КТ із параболічним і прямокутним потенціалами. Автори цих робіт використали ортонормований базис точних розв'язків рівняння

Шредінгера для сферичної КТ без збурень.

Порівняння методу матричної діагоналізації та варіаційного методу були здійснені в роботах [64-65], де досліджувались вплив магнітного поля на сферичну КТ. Результати, отримані за допомогою варіаційного методу, у випадку КТ без домішки і розгляду лиш основного і кількох нижніх збуджених рівнів енергії електрона, чудово узгоджуються з результатами, отриманими за допомогою методу діагоналізації.

Для багат шарових наносистем метод діагоналізації, який базується на розкладі ХФ за ортонормованим базисом точних розв'язків рівняння Шредінгера, вимагає проведення складних числових обчислень. Тому оптимальним було б використання прямого чисельного розв'язку рівняння Шредінгера методом скінченних елементів, який інтенсивно використовується для розрахунку ХФ та енергетичного спектру електронних наносистем [165], особливо у випадках КТ несферичної форми [145, 170-171], коли інші методи можуть бути проблематичними. У роботі [170] методом скінченних елементів проведено теоретичне дослідження оптичних та електронних властивостей електрона в циліндричній КТ у присутності довільно розташованої донорної домішки з урахуванням впливу магнітного поля. Дослідження виконались в наближенні ефективної маси. Було виявлено, що незалежно від наявності чи відсутності донорної домішки енергія основного стану завжди є зростаючою функцією магнітного поля, тоді як збуджені стани демонструють змішану поведінку: в певному діапазоні магнітного поля вони спочатку зменшуються, а потім знову зростають зі збільшенням інтенсивності магнітного поля.

При дослідженні впливу магнітного поля на БСКТ з ядром-бар'єром спостерігаються осциляції основного стану електрона, що є наслідком ефекту Ааронова-Бома. Це квантово-механічне явище, яке демонструє, що заряджена частинка може зазнавати впливу електромагнітного потенціалу, навіть якщо вона знаходиться в регіоні простору, де магнітне поле (або електричне поле) відсутнє. Вплив пояснюється тим, що навіть у зонах, де індукція магнітного поля дорівнює

нулю, векторний потенціал залишається ненульовим. Цей ефект був вперше детально розглянутий Я. Аароном і Д. Бомом [172], а його дослідження в наноструктурах проводилося в роботах [173-174] на прикладі напівпровідникових тороїдальних кілець в однорідному магнітному полі.

Енергія основного стану електрона в КТ під дією магнітного поля зростає, але через ефект Ааронова-Бома, при певних значеннях магнітного поля, електрон у станах з магнітним квантовим числом $m < 0$ має таку ж саму енергію, як і у стані з $m = 0$ за відсутності поля. Внаслідок цього основний стан почергово складається зі станів з $m = 0, -1, -2, \dots$ що можна спостерігати в роботах [65, 69, 97] де досліджено БСКТ із ядром-бар'єром.

Окрім магнітного поля, зовнішнє однорідне електричне поле також впливає на енергетичний спектр та хвильові функції квазічастинок у БСКТ.

У роботах [139-140], використовуючи метод теорії збурень, було досліджено сили осцилятора, лінійні, нелінійні третього порядку та повні коефіцієнти поглинання у сферичних та еліпсоїдальних КТ. Результати показують, що сила осцилятора та коефіцієнти поглинання сильно залежать від інтенсивності електричного поля та типу кулонівської домішки. В [145] вивчено одночасний вплив електричного поля, неглибокої донорної домішки та геометричної форми на електронні стани в еліпсоїдальних КТ ядро-оболонка $ZnS/CdSe$. У [147] та [76] автори в дослідили вплив електричного поля на лінійний та нелінійний коефіцієнт поглинання та поперечний переріз фотоіонізації домішки у сферичній КТ. В [145] методом скінченних елементів вивчено одночасний вплив електричного поля, неглибокої донорної домішки та геометричної форми на електронні стани в еліпсоїдальних КТ ядро-оболонка $ZnS/CdSe$. Вивчення впливу електричного поля на енергетичні стани носіїв заряду у КТ II типу здійснено авторами у роботі [151].

Важливим є також дослідження комбінованого впливу електричних і магнітних полів на КТ, оскільки їхня одночасна взаємодія може викликати ефекти, які не спостерігаються при застосуванні кожного поля окремо. Така взаємодія призводить до складних і часто нелінійних змін в електронних, оптичних і

магнітних властивостях КТ. При одночасному застосуванні електричного та магнітного полів ефекти Штарка та Зеемана проявляються одночасно, що призводить до більш складної модифікації енергетичних рівнів і хвильових функцій КТ. Крім того, одночасне застосування електричного та магнітного полів може значно змінювати форму та орієнтацію ХФ електронів і дірок. Це впливає на перекриття ХФ носіїв заряду, що, своєю чергою, впливає на швидкість рекомбінації та інтенсивність світла, випромінюваного КТ. Дослідження одночасного впливу електричного і магнітного полів було здійснено в статтях [170-171, 175-186].

Вивчення впливу зовнішніх полів на КТ є важливим як для фундаментального розуміння фізичних процесів у нанорозмірних системах, так і для їх практичного застосування. Вивчаючи реакцію КТ на електричні та магнітні поля, дослідники отримують можливість розробляти нові технології та вдосконалювати вже існуючі пристрої, що використовують квантові точки, такі як оптоелектронні компоненти, сенсори та сонячні елементи.

Висновки до розділу 1

У цьому розділі було розглянуто різні типи наноструктур, методи вирощування КТ, їх практичне застосування, а також результати теоретичних досліджень впливу зовнішніх полів, донорних та акцепторних домішок на оптичні властивості сферичних наноструктур.

Для дослідження впливу домішок, електричних і магнітних полів на енергетичні рівні та ХФ електрона, енергію його зв'язку з домішкою, КП, сили осцилятора та ін. необхідно розв'язати рівняння Шредінгера. В багатьох роботах використовуються наближені методи, такі як метод теорії збурень та варіаційний метод. Ці методи не дозволяють отримати високу точність для енергій і ХФ збуджених станів електронів, особливо при великих значеннях збурень, які виникають за рахунок взаємодії електрона з домішками і дією на нього потужних зовнішніх полів. У розглянутих теоретичних дослідженнях використовувались такі

методи розв'язку рівняння Шредінгера, як метод метод Рунге-Кутта, скінченних елементів, метод стрільби, а також метод розкладу хвильової функції на основі ортонормованого базису.

З розділу видно, що подібні дослідження є досить актуальними, вони мають важливе значення для розкриття повного потенціалу нанорозмірних матеріалів у різноманітних найсучасніших оптоелектричних приладах. Оскільки КТ мають високу чутливість до навколишнього середовища через їхній малий розмір і ефекти квантового обмеження, навіть незначні зміни умов зовнішнього середовища або внутрішнього складу можуть істотно змінювати їхні властивості. Глибоке розуміння цих ефектів є критично важливим для створення високопродуктивних, точних і стабільних пристроїв на основі квантових точок.

Варто зазначити, що більшість досліджень фокусується на домішках, розміщених у центрі сферичних КТ, а також на одночасному впливі центральної домішки й електричного або магнітного полів. Малодослідженими залишаються питання впливу зовнішніх полів і домішок на КТ II типу, а також одночасний вплив зовнішніх полів і нецентральної домішки на БСКТ.

РОЗДІЛ 2. ВПЛИВ ЕЛЕКТРИЧНОГО ТА МАГНІТНОГО ПОЛІВ НА ПОПЕРЕЧНИЙ ПЕРЕРІЗ ФОТОІОНІЗАЦІЇ ВОДНЕВОПОДІБНОЇ ДОМІШКИ В БАГАТОШАРОВИХ СФЕРИЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧКАХ

ПФД це ймовірність того, що фотон, який взаємодіє з КТ, іонізує атом або домішку всередині неї. Розмір ПФД є важливим параметром, що визначає ефективність взаємодії КТ зі світлом та іншим електромагнітним випромінюванням. Великі перерізи фотоіонізації зазвичай забезпечують більш ефективне поглинання світла, що робить КТ придатними для використання в приладах, де потрібна висока чутливість та швидка реакція, таких як квантові датчики, сонячні елементи та фотодетектори. З іншого боку, низькі перерізи фотоіонізації застосовуються в пристроях, де важливі точність, стабільність і мінімальне поглинання енергії, як, наприклад, у квантових комп'ютерах та джерелах світла низької інтенсивності. Тому вивчення методів керування величиною ПФД є актуальною темою для досліджень.

Основною метою цього розділу є дослідження впливу зовнішнього електричного і магнітного полів, положення домішки та розмірів БСКТ на енергетичні рівні електрона, енергію зв'язку електрона з домішкою та ПФД водневоподібної домішки.

Дослідження були зроблені для одноямних та двоямних БСКТ. Для даних наносистем задачі були розв'язані у наближенні ефективної маси та моделі прямокутних потенціальних бар'єрів, використовуючи метод розкладу ХФ по повному набору функцій, отриманих як точні розв'язки рівняння Шредінгера в наноструктурі без домішок та зовнішніх полів, а також методом скінченних елементів.

Показано, що зміна розміру КТ та збільшення інтенсивності зовнішніх полів змінює локалізацію електрона в наноструктурі, що значно впливає на енергетичний спектр електрона та ПФД.

Основні результати розділу представлені в роботах [187-191].

2.1. Вплив електричного поля на поперечний переріз фотоіонізації домішки в однопоточній багатопоточній сферичній квантовій точці

2.1.1. Розв'язок рівняння Шредінгера для електрона у багатопоточній сферичній квантовій точці в електричному полі

Розглядається багатопоточна напівпровідникова сферична КТ, що складається з ядра $Al_xGa_{1-x}As$ (потенціальний бар'єр з радіусом r_0) і двох оболонок: $GaAs$ (потенціальна яма) і $Al_yGa_{1-y}As$ (потенціальний бар'єр з внутрішнім радіусом r_1 і зовнішнім r_2 відповідно), поміщену в напівпровідникову матрицю-бар'єр. Положення водневоподібної домішки визначається радіус-вектором $\vec{r}_{imp}$. Схема потенціальної енергії і геометрична схема БСКТ зображені на рисунку 2.1. Профіль потенціальної енергії має вигляд сферичної потенціальної ями скінченної глибини з шириною $\Delta = r_1 - r_0$. Висоти внутрішнього V_1 та зовнішнього V_2 потенціальних бар'єрів визначаються процентним вмістом алюмінію у ядрі та зовнішній оболонці БСКТ відповідно.

Для дослідження ХФ та енергетичного спектру електрона у КТ під впливом домішки та електричного поля було розв'язано рівняння Шредінгера з гамільтоніаном

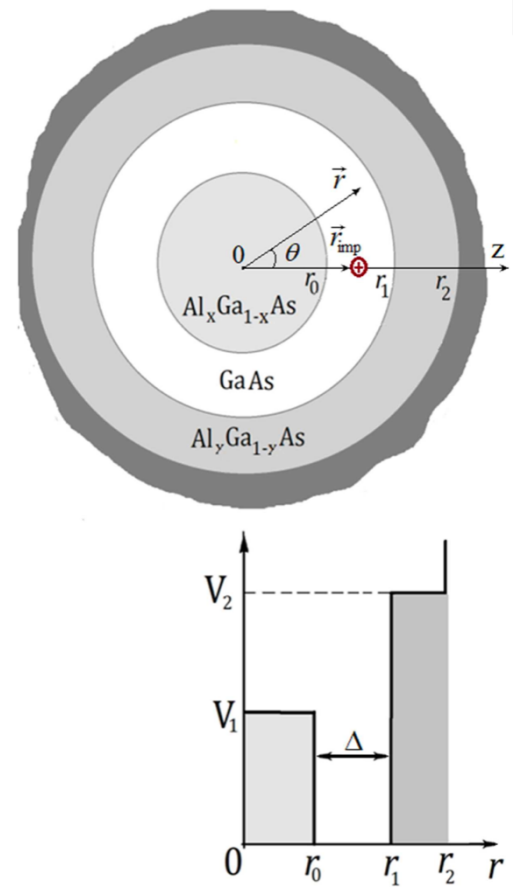


Рисунок 2.1. Геометрична та потенціальна схема БСКТ $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_yGa_{1-y}As$.

$$H = \vec{\nabla} \frac{\hbar^2}{2\mu(r)} \vec{\nabla} + \frac{Ze^2}{\varepsilon|\vec{r} - \vec{r}_{imp}|} + U_F(\vec{r}) + U(r). \quad (2.1)$$

Тут потенціал $U(r)$ і ефективна маса $\mu(r)$ наступні

$$U(r) = \begin{cases} V_1, & 0 < r \leq r_0 \\ 0, & r_0 < r \leq r_1 \\ V_2, & r_1 < r \leq r_2 \\ \infty, & r > r_2 \end{cases}, \quad (2.2)$$

$$\mu(r) = \begin{cases} m_0, & 0 < r \leq r_0 \\ m_1, & r_0 < r \leq r_1 \\ m_2, & r_1 < r \leq r_2 \end{cases}. \quad (2.3)$$

У випадку коли домішка розташована на осі Oz , то задача має циліндричну симетрію і $|\vec{r} - \vec{r}_{imp}| = \sqrt{r^2 + r_{imp}^2 - 2rr_{imp}\cos\theta}$. У загальному випадку потенціальна енергія електрона з координатами (r, θ, φ) у зовнішньому електричному полі має вигляд [104]

$$U_F(\vec{r}) = |e|\vec{F}\vec{r} = |e|Fr(\sin\theta\sin\beta\cos\varphi + \cos\theta\cos\beta), \quad (2.4)$$

де F – інтенсивність електричного поля, β – кут між $\vec{F}$ та віссю Oz . В цьому випадку Гамільтоніан (2.1) залежить від обох кутів (θ, φ) і циліндрична або сферична симетрія задачі втрачається. Таким чином, розв'язати рівняння Шредінгера стає проблемою.

Щоб спростити розрахунки, було розглянуто два напрямки електричного поля: коли поле напрямлене вздовж вісі Oz ($\beta = 0$) і в протилежному їй напрямку ($\beta = \pi$). Враховуючи ці умови, потенціал енергії електрона матиме вигляд

$$U_F(\vec{r}) = |e|\vec{F}\vec{r} = |e|Frcos\theta, \quad (2.5)$$

де, якщо $F > 0$, то поле спрямоване вздовж вісі Oz , а якщо $F < 0$ – у протилежному напрямку. У результаті, задача тепер має циліндричну симетрію, де гамільтоніан залежить лише від полярного кута (φ) , а електронні стани характеризуються магнітним квантовим числом m . Далі, для дослідження впливу електричного поля, використано метод розкладу ХФ електрона ($\Psi_{jm}(\vec{r})$) по повному набору його

власних функцій ($\Phi_{nlm}(\vec{r})$) у сферичній наноструктурі без поля та домішок ($F = 0, Z = 0$) [70, 97]

$$\Psi_{jm}(\vec{r}) = \sum_n \sum_l c_{nl}^{jm} \Phi_{nlm}(\vec{r}), \quad (2.6)$$

де $\Phi_{nlm}(\vec{r})$ отримані як точні розв'язки рівняння Шредінгера

$$\vec{\nabla} \frac{\hbar^2}{2\mu(r)} \vec{\nabla} \Phi_{nlm}(\vec{r}) + U(r) \Phi_{nlm}(\vec{r}) = E_{nl} \Phi_{nlm}(\vec{r}). \quad (2.7)$$

З урахуванням сферичної симетрії, ХФ електрона можна записати у вигляді

$$\Phi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (2.8)$$

тут $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ – сферичні функції, а $R_{nl}(r)$ – радіальна частина, яка має вигляд

$$R_{nl}(r) = \begin{cases} A_{nl}^0 i_l(k_{nl}^{(0)} r), & E_{nl} < V_1 \\ A_{nl}^0 j_l(k_{nl}^{(0)} r), & E_{nl} \geq V_1 \\ A_{nl}^{(1)} j_l(k_{nl}^{(1)} r) + B_{nl}^{(1)} n_l(k_{nl}^{(1)} r) & \\ A_{nl}^{(2)} i_l(k_{nl}^{(2)} r) + B_{nl}^{(2)} \kappa_l(k_{nl}^{(2)} r), & E_{nl} < V_2 \\ A_{nl}^{(2)} j_l(k_{nl}^{(2)} r) + B_{nl}^{(2)} n_l(k_{nl}^{(2)} r), & E_{nl} \geq V_2 \end{cases} \quad (2.9)$$

де j_l і n_l та i_l і κ_l є відповідно сферичними та модифікованими сферичними

функціями Бесселя першого та другого роду, а $k_{nl}^{(1)} = \sqrt{2m_1 E_{nl}^0 / \eta}$, $k_{nl}^{(0,2)} = \sqrt{2m_{(0,2)} |V_{(1,2)} - E_{nl}| / \eta}$.

Невідомі коефіцієнти $A_{nl}^{(i)}$, $B_{nl}^{(i)}$ та енергії електрона E_{nl} у БСКТ за відсутності електричного поля та домішки визначаються використовуючи умови неперервності ХФ та потоків густини ймовірності на межах системи:

$$\left. \begin{aligned} R_{nl}^{(i)}(r_i) &= R_{nl}^{(i+1)}(r_i). \\ \frac{1}{m_i} \frac{dR_{nl}^{(i)}(r)}{dr} \Big|_{r=r_i} &= \frac{1}{m_{i+1}} \frac{dR_{nl}^{(i+1)}(r)}{dr} \Big|_{r=r_i} \end{aligned} \right\}, i = 0, 1. \quad (2.10)$$

На зовнішній межі БСКТ ХФ дорівнює нулю $R_{nl}^{(2)}(r_2) = 0$, а умова нормування має вигляд $\int_0^{r_2} |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr = 1$.

Енергетичний спектр (E_{jm}) і коефіцієнти розкладу (c_{jm}) для нової ХФ (2.6) отримуються із секулярного рівняння

$$|H_{nl,n'l'} - E_{jm} \delta_{n,n'} \delta_{l,l'}| = 0, \quad (2.11)$$

де матричні елементи $H_{nl,n'l'}$ мають вигляд

$$H_{n'l',nl} = E_{nl}^0 \delta_{n',n} \delta_{l',l} + |e| F (\alpha_{l,m} \delta_{l',l+1} + \beta_{l,m} \delta_{l',l-1}) U_{n'l',nl} + F_{n'l',nl} \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned} \text{де} \quad \alpha_{l,m} &= \sqrt{\frac{l^2 - (m+1)^2}{(2l+3)(2l+1)}}, \quad \beta_{l,m} = \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1}}, \quad U_{n'l',nl} = \int_0^{r_2} r^3 R_{n'l'}^*(r) R_{nl}(r) dr, \\ F_{n'l',nl} &= \int_0^{r_2} \int_0^\pi R_{n'l'}(r) P_l^m(\cos\theta) \frac{2Zs \sin\theta}{\sqrt{r^2 + r_{imp}^2 - 2rr_{imp} \cos\theta}} * \\ &* R_{nl}(r) P_l^m(\cos\theta) d\theta r^2 dr. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Енергетичний спектр і ХФ електрона, з урахуванням його кулонівської взаємодії з донорною домішкою, розташованою на осі Oz наноструктури, керованою зовнішнім електричним полем, повністю визначаються отриманими власними значеннями (E_{jm}) і власними векторами (c_{jm}^{nl}) матриці $H_{nl,n'l'}$ для кожного m . Тут нові функції $\Psi_{jm}(\vec{r})$, що відповідають фіксованому магнітному квантовому числу m , отримуються із розкладу (2.6) за ХФ $\Phi_{nlm}(r)$ з тим самим значенням m . Електронні стани описуються двома квантовими числами j і m , де j відповідає номеру енергетичного рівня для фіксованого m . Через порушення сферичної симетрії задачі під впливом домішки та електричного поля орбітальне квантове число l перестає бути квантовим числом. У результаті нові квантові стани

можна представити як лінійні комбінації станів із різними значеннями l . Проте, для зручності ці стани позначаються індексом l , відповідно до орбітального квантового числа незбуреної ХФ, яка дає найбільший внесок у розклад (2.6). Наприклад, $\Psi_{1s}^{Z=1}(\vec{r})$ і $\Psi_{1s}^{Z=0}(\vec{r})$ – ХФ електрона в основному стані в наноструктурі під впливом електричного поля з домішкою та без неї відповідно.

Вираз для поперечного перерізу фотоіонізації домішки в дипольному наближенні [76, 194] має вигляд

$$\sigma(\hbar\omega) = \frac{4\pi^2}{3n_r} \left(\frac{F_{eff}}{F_0} \right)^2 \beta_{FS} \hbar\omega \sum_f M_{if}^2 \delta(E_f^{Z=0} - E_i^{Z=1} - \hbar\omega), \quad (2.14)$$

тут $M_{if} = |\langle \psi_f^{Z=0} | r \cos\theta \psi_i^{Z=1} \rangle|$, $\delta(E_f^{Z=0} - E_i^{Z=1} - \hbar\omega) = \frac{\Gamma}{\pi[(E_b^{if} - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2]}$, де $\hbar\omega$ – енергія падаючого фотона, n_r – показник заломлення, $\beta_{FS} = 1/137$ – постійна тонкої структури. Ми припускаємо, що $\frac{F_{eff}}{F_0} = 1$, оскільки це відношення важко обчислити, але воно не впливає на форму ПФД [76, 194], $\Gamma = 0,4 \text{ meV}$ [76]. У (2.14) також враховано, що вектор поляризації падаючого випромінювання співнаправлений з віссю Oz , як у роботах [93, 96, 142]. Оскільки (2.14) містить лише переходи з основного стану $\Psi_{1s}^{Z=1}(\vec{r})$, а правила відбору дозволяють переходи з $\Delta m = 0$, то розглядаються лише стани з $m = 0$.

Енергія зв'язку E_b^{if} визначається як різниця між енергією основного стану електрона в КТ з домішкою та його енергією без домішки

$$E_b^{if} = E_f^{Z=0} - E_i^{Z=1}. \quad (2.15)$$

З (2.12) видно, що ПФД домішки як функція енергії падаючого фотона має кілька піків, які відповідають певним квантовим переходам. Розташування кожного піку визначається енергією зв'язку (E_b^{if}), а його висоту можна знайти з виразу

$$\sigma_{if}^0 = \frac{4\pi^2}{3n_r} \beta_{FS} E_b^{if} M_{if}^2 / \Gamma. \quad (2.16)$$

Зрозуміло, що висота піку ПФД (σ_{if}^0) залежить від енергії зв'язку E_b^{if} та дипольного моменту квантового переходу M_{if}^2 .

2.1.2. Чисельний аналіз впливу електричного поля та положення домішки на енергетичний спектр та поперечний переріз фотоіонізації домішки

Комп'ютерні розрахунки виконано для наноструктури $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ з такими фізичними параметрами: $m_0 = 0,083x + 0,067$, $m_1 = 0,067$, $m_2 = 0,083y + 0,067$, $V_1 = 0,6(370x^2 + 1155x)$ меВ, $V_2 = 0,6(370y^2 + 1155x)$ меВ, $r_0 = 5$ нм, $r_1 = 10$ нм, $r_2 = 15$ нм ($r_0 = 5$ нм, $r_1 = 15$ нм, $r_2 = 20$ нм), середня діелектрична проникність $\varepsilon = 11,5$.

Незважаючи на скінченну величину V_2 , достатня кількість дискретних енергетичних рівнів у розкладі (2.6) забезпечується нескінченним потенціальним бар'єром при $r \geq r_2$, як у [70, 97]. Таким чином, можна отримати енергетичний спектр та ХФ електрона з високою точністю.

Для аналізу впливу висоти бар'єрів V_1 та V_2 на низькоенергетичні стани електрона (E_{nl} та $E_{nlm}^{Z=1}$), були побудовані залежності енергій від концентрації алюмінію в ядрі (x) та зовнішній оболонці (y) для структур з різною шириною потенціальної ями ($\Delta = 5$ нм та $\Delta = 10$ нм).

На рисунку 2.2 залежність енергетичного спектра електрона у наносистемі від процентного вмісту алюмінію в ядрі та у зовнішній оболонці зображені для двох випадків: суцільні лінії відповідають наноструктурі без домішки ($Z = 0$), а штрихові — наноструктурі з домішкою ($Z = 1$), яка розташована в центрі потенціальної ями ($r_{imp} = (r_0 + r_1)/2$), оскільки тут її вплив на спектр електрона

найсильніший [76, 194].

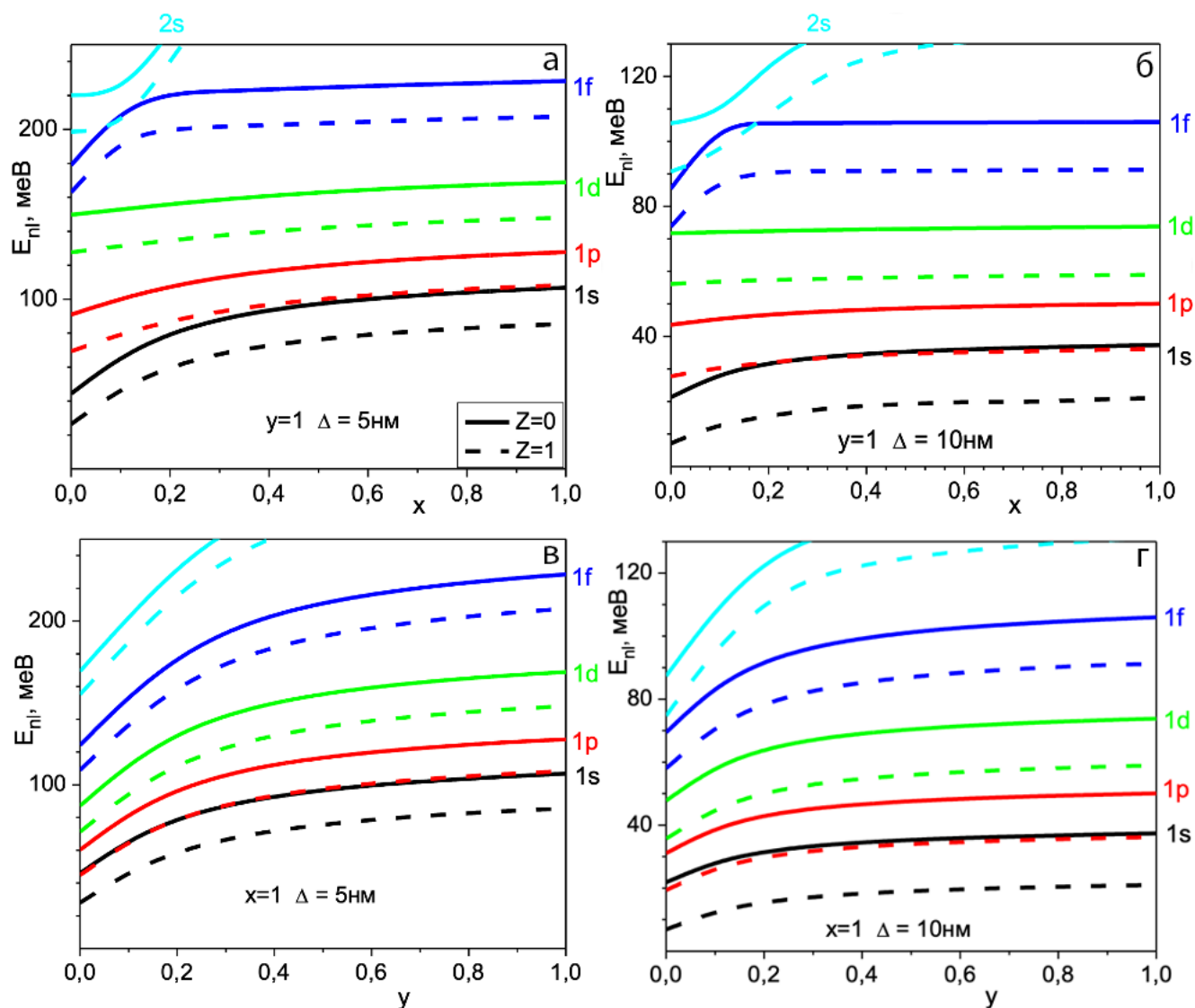


Рисунок 2.2. Залежність енергетичного спектра електрона у наносистемі від процентного вмісту алюмінію в ядрі (а, б) та у зовнішній оболонці (в, г) при $\Delta = 5$ нм (а, в) та $\Delta = 10$ нм (б, г) (суцільні лінії – без домішки; штрихові лінії - при наявності донорної домішки у центрі потенціальної ями *GaAs*).

Рисунок 2.2 показує, що енергії чотирьох найнижчих енергетичних рівнів як функції концентрації алюмінію (x і y), виходять на насичення в обох випадках ($Z = 0$ і $Z = 1$). При $\Delta = 10$ нм насичення починається при $x = 0.2$ і $y = 0.3$, тоді як при $\Delta = 5$ нм, через сильніший ефект розмірного квантування, воно починається при $x = 0.5$ і $y = 0.8$.

Усі числові розрахунки для ПФД домішки виконані для БСКТ $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$. Однак, на основі результатів, наведених на рисунку 2.2, можна оцінити оптичні властивості подібних наноструктур з різною концентрацією алюмінію.

Залежність енергетичного спектра електрона (при $m = 0$) в наноструктурі з донорною домішкою ($r_{imp} = (r_0 + r_1)/2$) від інтенсивності електричного поля F представлена на рисунку 2.3. Різниця між енергіями $E_{1s}^{Z=1}$ і $E_{nl}^{Z=0}$ визначає енергії зв'язку E_b^{1s-nl} (2.15) при різних значеннях F . Якщо електричне поле, спрямоване уздовж осі Oz ($F > 0$), зростає, енергія зв'язку зменшується, оскільки поле зміщує електрон у протилежний до електричного поля напрямок. При $F < 0$ відбувається зворотне – енергія зв'язку зростає.

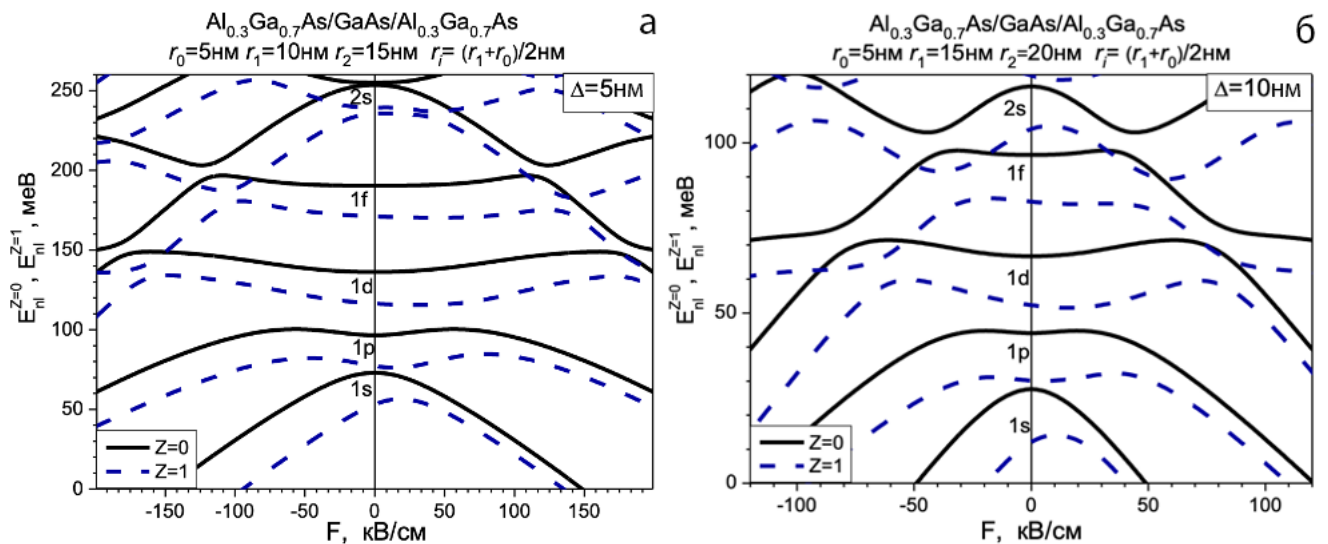


Рисунок 2.3. Залежність енергетичного спектра електрона від напруженості електричного поля F у наносистемі $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ з $\Delta = 5$ нм (а) та $\Delta = 10$ нм (б). Штрихові лінії відповідають наноструктурі з домішкою в центрі потенціальної ями, суцільні лінії – наноструктурі без домішки.

Крім того, з рисунку 2.3 видно, що електричне поле сильніше впливає на s -стани, ніж на інші (p , d , f). Також, можна побачити антиперетин енергетичних рівнів ($2s$ з $1f$ і $1d$), який відбувається через зняття виродження енергетичного спектра за магнітним квантовим числом.

На рисунку 2.4 наведена залежність енергії зв'язку ($E_b^{1s-1s^0}(F) = E_{1s}^{Z=0}(F) - E_1^{Z=1}(F)$) при різних положеннях домішки. Видно, що при малих розмірах потенціальної ями (рисунок 2.4а) залежність енергії зв'язку від напруженості електричного поля має монотонний характер, натомість для ширшої ями поведінка енергії зв'язку при $r_{imp} = r_0$ та $r_{imp} = (r_0 + r_1)/2$ є немонотонною (рисунок 2.4б).

Це пояснюється тим, що електричне поле спочатку зміщує електрон у бік домішки, однак при певному значенні поля F електрон починає зміщуватися до зовнішньої стінки потенціальної ями, що призводить до зниження енергії зв'язку. Енергія зв'язку досягає максимуму, коли домішка знаходиться в центрі потенціальної ями при $F < 0$.

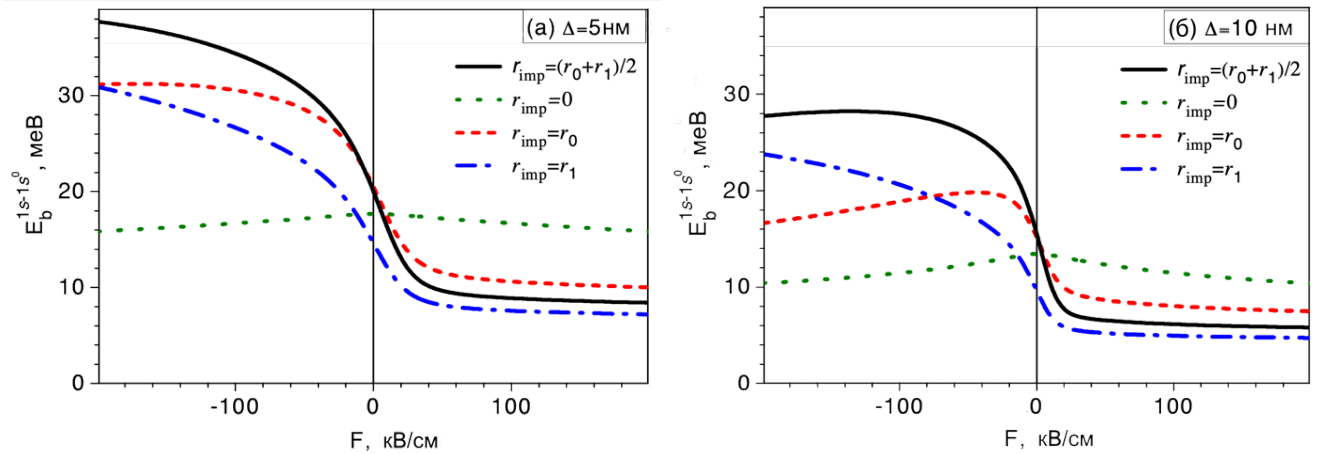


Рисунок 2.4. Залежність енергії зв'язку електрона з домішкою в наносистемі від напруженості електричного поля при $r_{imp} = 0, r_0, r_1, r_2, (r_0 + r_1)/2$ при $\Delta = 5$ нм (а) та $\Delta = 10$ нм (б).

Дослідження ПФД було виконано для наносистеми $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ з шириною потенціальної ями $\Delta = 5$ нм та $\Delta = 10$ нм враховуючи різні положення домішки та величини інтенсивності електричного поля.

Рисунок 2.5 показує залежність ПФД від енергії падаючого фотона для наноструктури з різними положеннями домішки при $F = 0$. Максимуми, що мають вигляд δ -функцій, спричинені квантовими переходами $1s - 1s^0$ (рисунок 2.5а) і $1s - 1p^0$ (рисунок 2.5б), значно відрізняються за висотою. На рисунку 2.5а

представлений квантовий перехід $1s - 1s^0$ для $r_{imp} = r_0$, $r_{imp} = r_1$ і $r_{imp} = (r_0 + r_1)/2$. При $r_{imp} = 0$ цей перехід відсутній, оскільки він заборонений правилами відбору через сферичну симетрію задачі. Для нецентральної домішки сферична симетрія порушується, тому дипольний момент цього переходу не дорівнює нулю. Чим більша енергія зв'язку електрона з домішкою, тим більша величина M_{1s-1s^0} і, відповідно, пік $\sigma_0^{1s-1s^0}$ стає вищим. Найвищий пік спостерігається при $r_{imp} = (r_0 + r_1)/2$. Квантовий перехід $1s - 1p^0$ дозволений для будь-якого положення домішки, і енергія цього переходу вдвічі більша, ніж для переходу $1s - 1s^0$, при цьому $\sigma_0^{1s-1p^0}$ значно перевищує $\sigma_0^{1s-1s^0}$.

Під дією електричного поля ситуація змінюється, оскільки поле ще більше порушує сферичну симетрію задачі. Внаслідок цього зростає внесок станів з різними значеннями l у розкладі хвильової функції (2.6), що суттєво впливає на величини ПФД і призводить до їх значних змін.

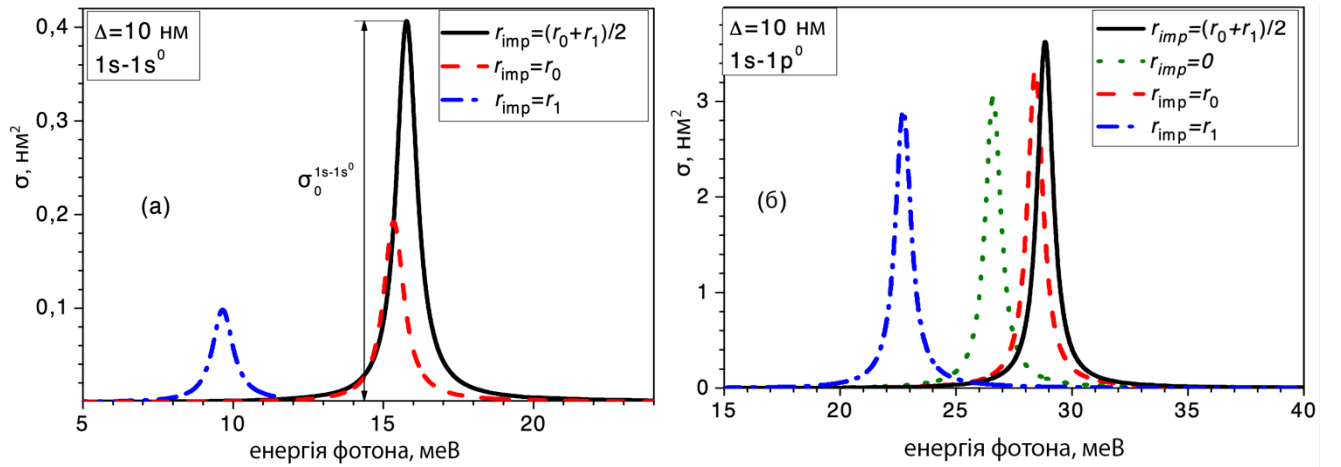


Рисунок 2.5. Залежність ПФД домішки ($\sigma_0^{1s-1s^0}$ (а) та $\sigma_0^{1s-1p^0}$ (б)) від енергії фотона для наноструктури з $\Delta = 10$ нм при різних положеннях домішки: $r_{imp} = 0$; r_0 ; $(r_0 + r_1)/2$; r_1 .

На рисунку 2.6 представлено ПФД домішки для квантових переходів $1s - 1s^0$, $1s - 1p^0$ та $1s - 1d^0$ як функція енергії фотона для наноструктури з $\Delta = 5$ нм і $\Delta = 10$ нм, де домішка розташована в центрі потенціальної ями ($r_{imp} = (r_0 +$

$r_1)/2)$ при різних інтенсивностях електричного поля $F = 0, 10, 50$ кВ/см. З рисунка видно, що висота піку $\sigma_0^{1s-1p^0}$ набуває максимального значення при $F = 0$, а зі збільшенням інтенсивності електричного поля поступово зменшується і немонотонно зміщується. Подібна поведінка спостерігається і для піку $\sigma_0^{1s-1d^0}$. Висота піку $\sigma_0^{1s-1s^0}$, який відповідає переходу між основними станами електрона, змінюється немонотонно і досягає максимального значення при $F = 50$ кВ/см. Зі збільшенням напруженості поля функція $\sigma_0^{1s-1s^0}(F)$ зміщується в область нижчих енергій, що пояснюється залежністю енергії зв'язку від інтенсивності електричного поля $E_b^{1s-1s^0}(F)$, представленою на рисунку 2.4, і підтверджується результатами роботи [76]. У свою чергу, немонотонне зміщення піку $\sigma_0^{1s-1p^0}$ пояснюється поведінкою функції $E_b^{1s-1p^0}(F)$, яка визначається різницею відповідних енергій, представлених на рисунку 2.3.

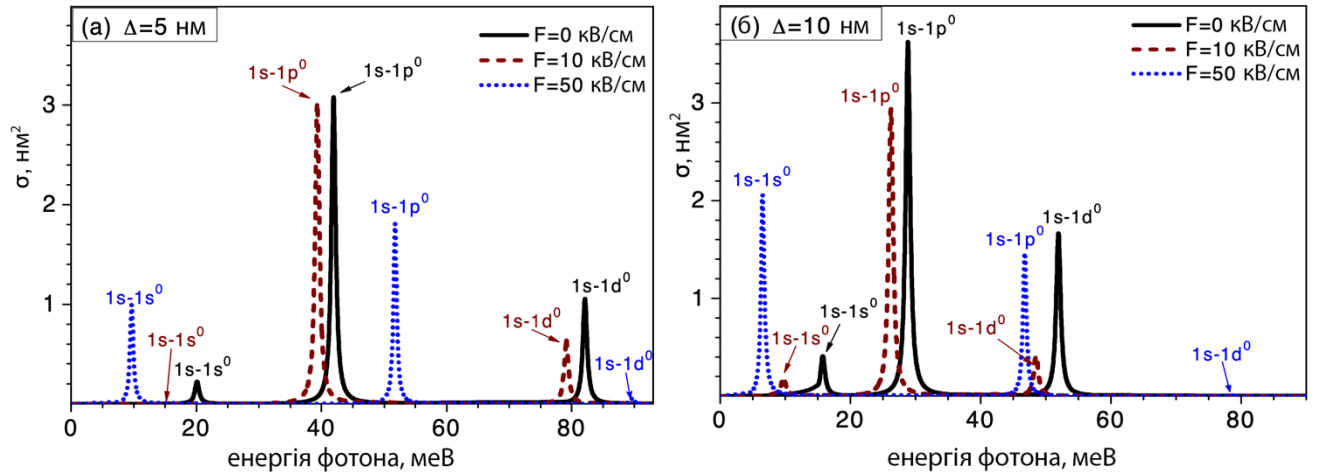


Рисунок 2.6. ПФД домішки для переходів $1s - 1s^0$, $1s - 1p^0$ та $1s - 1d^0$ як функція енергії фотона для наноструктури з $\Delta=5$ нм (а), $\Delta= 10$ нм (б) та $r_{imp} = (r_0 + r_1)/2$ при $F = 0, 10, 50$ кВ/см.

На рисунку 2.7 представлені залежності піків ПФД домішки $\sigma_0^{if}(F)$ для квантових переходів $1s - 1s^0$, $1s - 1p^0$, $1s - 1d^0$ при положеннях домішки $r_{imp} = 0$ і $r_{imp} = (r_0 + r_1)/2$. Для центральної домішки (штрихові криві) функції

симетричні. При $F = 0$ дозволений лише квантовий перехід $1s - 1p^0$. Зі збільшенням інтенсивності поля $|F|$ спостерігається монотонне зменшення піку $\sigma_0^{1s-1p^0}$ і швидке зростання $\sigma_0^{1s-1s^0}$, при цьому величина піку $\sigma_0^{1s-1d^0}$ залишається майже нульовою при всіх значеннях інтенсивності поля. Якщо домішка розташована в центрі потенціальної ями (суцільні криві) функції $\sigma_0^{if}(F)$ стають асиметричними. При певній інтенсивності поля пік $\sigma_0^{1s-1s^0}$ досягає максимального значення, що добре узгоджується з результатами роботи [76]. Значення $\sigma_0^{1s-1d^0}$ при положенні $r_{imp} = (r_0 + r_1)/2$ значно більше, ніж при $r_{imp} = 0$, але воно швидко зменшується зі збільшенням інтенсивності електричного поля (при $F > 0$).

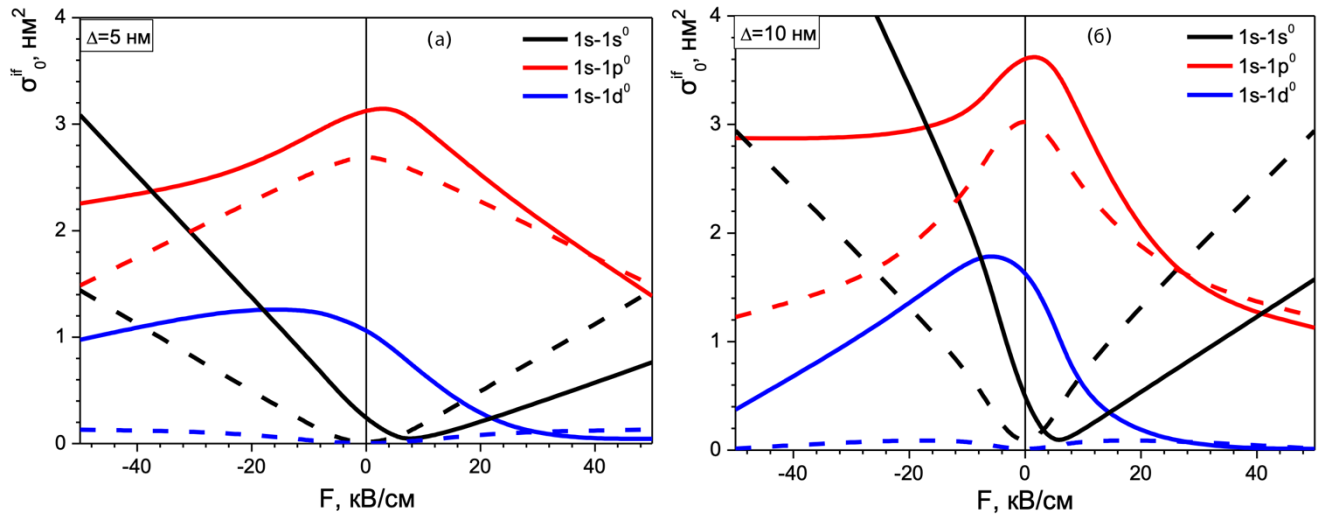


Рисунок 2.7. Залежність $\sigma_0^{if}(F)$ для наноструктури з $\Delta = 5$ нм (а), $\Delta = 10$ нм (б) при $r_{imp} = 0$ (штрихові криві) та $r_{imp} = (r_0 + r_1)/2$ (суцільні криві).

Отже, досліджено вплив електричного поля на ПФД домішки у БСКТ $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_yGa_{1-y}As$ з урахуванням квантових переходів електрона в основний та збуджені стани. ПФД як функція енергії фотона має кілька піків, що виникають у результаті відповідних квантових переходів. Положення цих піків визначається енергією зв'язку електрона з домішкою, а їх висоти, які характеризують ймовірність фотоіонізації домішки, залежать як від енергії зв'язку, так і від дипольного моменту квантового переходу. Отримано, що найвищий пік

ПФД спостерігається коли домішка розташована в центрі потенціальної ями $r_{imp} = (r_0 + r_1)/2$. Було встановлено, що незалежно від розташування домішки, за відсутності електричного поля основний внесок у ПФД вносить квантовий перехід $1s - 1p^0$, який дозволений правилами відбору для систем зі сферичною симетрією. Електричне поле, спрямоване вздовж осі Oz , спричиняє зміщення в область нижчих енергій піку який відповідає переходу $1s - 1s^0$, при цьому його висота стає максимальною при великих інтенсивностях поля.

Отримані результати щодо залежності ПФД від положення домішки в наноструктурі та від інтенсивності електричного поля можуть бути корисними для розробки квантових оптоелектронних пристроїв на основі БСКТ.

2.2. Вплив магнітного поля на поперечний переріз фотоіонізації домішки в однамній багат шаровій сферичній квантовій точці

2.2.1. Розв'язок рівняння Шредінгера для електрона у багат шаровій сферичній квантовій точці у магнітному полі

Розглядається БСКТ $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_yGa_{1-y}As$ з мілкою донорною домішкою, геометрична та потенціальна схема якої наведені на рисунку 2.8. Тут r_0 – радіус ядра, r_1 – радіус внутрішньої оболонки і r_2 – радіус зовнішньої оболонки. Ширина потенціальної ями визначається як $\Delta = r_1 - r_0$. Положення домішки описується радіус-вектором $\vec{r}_D$ і розташована вона вздовж осі Oz і збігається з напрямком прикладеного зовнішнього магнітного поля.

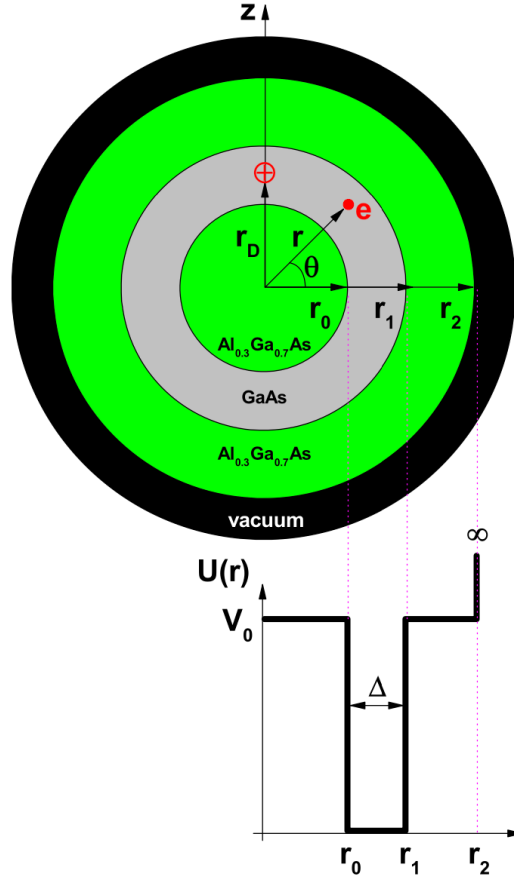


Рисунок 2.8. Геометрична та потенціальна схема БСКТ $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$.

Рівняння Шредінгера для електрона обмеженого в БСКТ $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_yGa_{1-y}As$ під впливом зовнішнього магнітного поля та за наявності мілкої донорної домішки виглядає так:

$$\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) \frac{1}{2\mu(\vec{r})} \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) \psi_f(\vec{r}) + \left[U(r) - \frac{Ze^2}{\varepsilon|\vec{r} - \vec{r}_D|} \right] \psi_f(\vec{r}) = E_f \psi_f(\vec{r}) \quad (2.17)$$

де

$$U(r) = \begin{cases} V_0, & 0 < r \leq r_0 \\ 0, & r_0 < r \leq r_1 \\ V_0, & r_1 < r \leq r_2 \\ \infty, & r > r_2 \end{cases} \quad (2.18)$$

та

$$\mu(r) = \begin{cases} m_0, & 0 < r \leq r_0 \\ m_1, & r_0 < r \leq r_1 \\ m_2, & r_1 < r \leq r_2 \end{cases} . \quad (2.19)$$

Якщо домішка розташована на осі Oz , то $|\vec{r} - \vec{r}_D| = \sqrt{r^2 + r_D^2 - 2rr_D \cos\theta}$ і задача має циліндричну симетрію. З врахуванням зв'язку між індукцією магнітного поля $\vec{B}$ та векторним потенціалом $\vec{A}$, де $\vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{r} \times \vec{B}$, гамільтоніан у рівнянні (2.17) матиме вигляд

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{\mu(r)} \vec{\nabla} + \frac{eB}{2c\mu(r)} L_z + \frac{e^2 B^2 r^2 \sin^2 \theta}{8c^2 \mu(r)} - \frac{Ze^2}{\varepsilon |\vec{r} - \vec{r}_D|} + U(r), \quad (2.20)$$

де $L_z = -\frac{i\hbar}{\partial\varphi}$ – проекція імпульсу на вісь Oz , а θ – кут між векторами $\vec{B}$ та $\vec{r}$. Враховуючи сталу Рідберга $R_y = \hbar^2/(2m_e a_B^2)$ як одиницю енергії та радіус Бора a_B як одиницю довжини, і вводячи параметр $\eta = e\hbar B/(2m_e c R_y)$, рівняння Шредінгера (2.17) матиме вигляд

$$\left[-\vec{\nabla} \frac{1}{\mu^*(r)} \vec{\nabla} + \frac{\eta}{\hbar\mu^*(r)} L_z + \frac{\eta^2 r^2 \sin^2 \theta}{4\mu^*(r)} - \frac{2Z}{\varepsilon |\vec{r} - \vec{r}_D|} + U(r) \right] \Psi_{jm}(\vec{r}) = E_{jm} \Psi_{jm}(\vec{r}), \quad (2.21)$$

де $\mu^*(r) = \mu(r)/m_e$ і m_e — маса вільного електрона.

Рівняння (2.21) не розв'язується аналітично. Таким чином, для отримання ХФ електрона використовується метод їх розкладу за повним базисом ХФ електрона в наноструктурі без магнітного поля та домішки

$$\Psi_{jm}(\vec{r}) = \sum_{n,l} c_{nlm}^j \Phi_{nlm}(\vec{r}), \quad (2.22)$$

$$\Phi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (2.23)$$

де $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ – сферичні функції, а радіальні хвильові функції $R_{nl}(r)$ описуються як

лінійна комбінація сферичних функцій Бесселя першого та другого роду [95].

Для визначення коефіцієнтів C_{nl}^{jm} та енергетичного спектру E_{jm} отримуємо секулярне рівняння

$$|H_{nlm,n'l'm'} - E_{jm}\delta_{n,n'}\delta_{l,l'}\delta_{m,m'}| = 0 \quad (2.24)$$

де елементи матриці $H_{nlm,n'l'm'}$ мають вигляд [64-65]

$$\begin{aligned} H_{nlm,n'l'm'} &= \int_0^{r_2} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \Phi_{n'l'm'}^* H \Phi_{nlm} d\varphi \sin\theta d\theta r^2 dr = \\ &= (E_{nl}^0 \delta_{n',n} + m\eta I'_{n'l,nl}) \delta_{l',l} + \eta^2 \frac{1}{4} (\alpha_{l,m} \delta_{l',l+2} + \beta_{l,m} \delta_{l',l} + \\ &\quad + \gamma_{l,m} \delta_{l',l-2}) I''_{n'l,nl} + F_{n'l',nl} \end{aligned} \quad (2.25)$$

3

$$I'_{n'l,nl} = \int_0^\infty \frac{r^2}{\mu^*(r)} R_{n'l'}^*(r) R_{nl}(r) dr,$$

$$I''_{n'l,nl} = \int_0^\infty \frac{r^4}{\mu^*(r)} R_{n'l'}^*(r) R_{nl}(r) dr,$$

$$\alpha_{lm} = -\sqrt{\frac{[(l+2)^2-m^2][(l+1)^2-m^2]}{(2l+5)(2l+3)^2(2l+1)}},$$

$$\beta_{lm} = 1 - \frac{(l+1)^2-m^2}{(2l+1)(2l+3)} - \frac{l^2-m^2}{4l^2-1},$$

$$\gamma_{lm} = -\sqrt{\frac{[(l-1)^2-m^2](l^2-m^2)}{(2l+1)(2l-1)^2(2l-3)}},$$

та

$$F_{n'l',nl} = - \int_0^{r_2} \int_0^\pi R_{n'l'}(r) P_{l'}^m(\cos\theta) \frac{2Z \sin\theta}{\varepsilon \sqrt{r^2 + r_D^2 - 2rr_D \cos\theta}} R_{nl}(r) P_l^m(\cos\theta) d\theta r^2 dr$$

Власні значення (E_{jm}) та власні вектори (C_{nlm}^j) матриці ($H_{nlm,n'l'm'}$) визначають енергетичний спектр та ХФ електрона в БСКТ з урахуванням магнітного поля та його кулонівської взаємодії з донорною домішкою, розташованою на осі Oz . У цьому випадку нові стани з магнітним квантовим числом m отримуються шляхом розкладу за станами з тим самим значенням m .

Граничні умови, які повинні бути виконані в даній задачі, включають наступне: на межах $r = r_0$ та $r = r_1$ повинні виконуватись умови Бена-Данієла–Дюка, тобто мають бути неперервними як сама ХФ, так і добуток оберненої величини ефективної маси на ХФ. Такі граничні умови накладаються через використання різних ефективних мас у областях, з якої складається наноструктура. Крім того, на межі $r = r_2$, через нескінченний потенціал обмеження, застосовуються граничні умови Діріхле, згідно яких ХФ повинна дорівнювати нулю на цій межі.

Використовуючи отримані енергії та ХФ електрона, можна розрахувати енергії переходу та ПФД домішки, які, відповідно, задані як

$$E^{1s-f} = E_f^{Z=0} - E_{1s}^{Z=1} \quad (2.26)$$

та

$$\sigma(\hbar\omega) = \frac{4\pi^2}{3n_r} \left(\frac{F_{eff}}{F_0} \right)^2 \beta_{FS} \hbar\omega \sum_f |M_{1s-f}|^2 \delta(E^{1s-f} - \hbar\omega), \quad (2.27)$$

де $\delta(E - \hbar\omega) = \frac{\Gamma}{\pi[(E - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2]}$, тут $\hbar\omega$ – енергія падаючого фотона, n_r – показник заломлення, $\beta_{FS} = 1/137$ – постійна тонкої структури, $F_{eff}/F_0 \approx 1$, $\Gamma = 0.4 \text{ meV}$ [65], і $M_{1s-f} = |\langle \psi_{1s}^{Z=1} | r \cos\theta \psi_f^{Z=0} \rangle|$ – дипольний момент квантового переходу. У рівнянні (2.27) враховано, що вектор поляризації падаючого світла збігається з віссю Oz .

2.2.2. Чисельний аналіз впливу магнітного поля та положення домішки на енергетичний спектр та поперечний переріз фотоіонізації домішки

У дослідженні проведено розрахунки для БСКТ $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_yGa_{1-y}As$ із такими фізичними параметрами: $x = 0.3$, $m_0 = (0,067 + 0,083x)m_e$, $m_1 = 0,067m_e$, $V_1 = 0,6(1155x + 370x^2)$ меВ = 227,9 меВ, середня діелектрична проникність $\varepsilon = 11,5$. Для порівняння були розглянуті наноструктури двох розмірів: $r_0 = 5$ нм, $r_1 = 15$ нм ($\Delta = 10$ нм), $r_2 = 20$ нм та $r_0 = 15$ нм, $r_1 = 25$ нм ($\Delta = 10$ нм), $r_2 = 30$ нм. У цьому дослідженні розглянуто прикладені магнітні поля з інтенсивністю до 30 Тл, які на сьогодні можливо отримати експериментально завдяки розвитку постійних надпровідних магнітів. У роботі [195] докладно описані експериментальні методи, розроблені протягом останнього десятиліття для досліджень в умовах сильних магнітних полях, що обґрунтовує використання такого діапазону магнітних полів у даному дослідженні.

У сферичній наноструктурі без домішок і зовнішніх полів енергетичний спектр електрона E_{nl}^0 характеризується радіальним (n) і орбітальним (l) квантовими числами. Потенціальна яма глибиною $V_1 = 227,9$ меВ і шириною $\Delta = 10$ нм містить 11 енергетичних рівнів (до $l = 6$) при $r_0 = 5$ нм і 21 рівень (до $l = 11$) при $r_0 = 15$ нм. Такої кількості доданків у розкладі рівняння (2.22) недостатньо для забезпечення високої точності розрахунку енергій електронів і ХФ у випадку нецентральної домішки [97]. Тому дискретні електронні стани з енергією, що перевищує V_1 , також включені в ортонормований базис. Їх достатньо для досягнення будь-якої необхідної точності, оскільки потенціальний бар'єр при $r = r_2$ є нескінченним. Кількість станів, розглянутих у розкладі $\Phi_{nlm}(\vec{r})$, збільшувалася доти, доки не була досягнута точність 0,1% для кількох найнижчих локалізованих станів у структурі. Ця точність була врахована як у випадку прикладеного магнітного поля, так і за наявності мілкої донорної домішки.

Залежності енергій електронів (з $m = 0$) від напруженості прикладеного

магнітного поля B у БСКТ $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ без домішки (штрихові лінії) та домішкою (суцільні лінії), яка розташована у центрі потенціальної ями, тобто $r_D = (r_0 + r_1)/2$, представлені на рисунку 2.9. Ці енергії більше не визначаються певним значенням орбітального квантового числа, оскільки електронні стани є комбінацією станів з різними значеннями l . Однак, для зручності, на рисунку 2.9 ці стани позначені як $1s$, $1p$, $1d$ і $1f$ якщо КТ містить домішку, і як $1s_0$, $1p_0$, $1d_0$ і $1f_0$ якщо домішки в КТ немає.

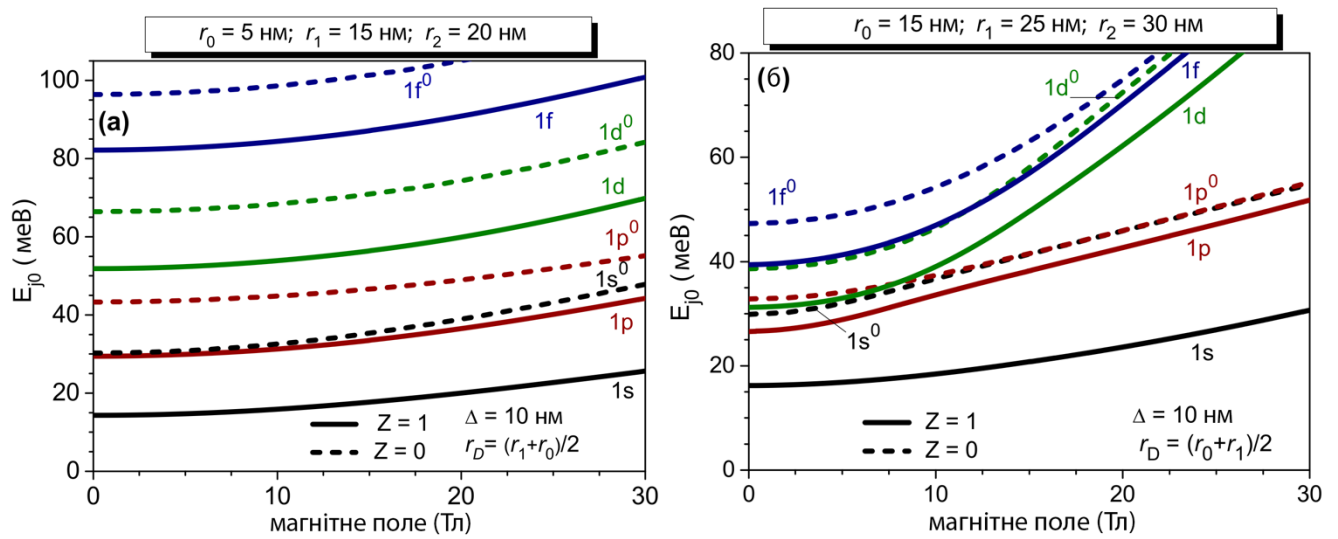


Рисунок 2.9. Залежність енергетичного спектра електрона в наносистемі з $r_0 = 5$ нм, $r_1 = 15$ нм і $r_2 = 20$ нм (а) і $r_0 = 15$ нм, $r_1 = 25$ нм і $r_2 = 30$ нм (б) від прикладеного магнітного поля. Домішка розташована в центрі потенціальної ями $r_D = (r_0 + r_1)/2$.

Було показано, що в наноструктурі з $r_0 = 5$ нм вплив магнітного поля на енергетичний спектр електрона незначний (рисунок 2.9а), тоді як для $r_0 = 15$ нм при $B = 8$ Тл спостерігаються антиперетини енергетичних рівнів $1p$ і $1d$ та $1d$ і $1f$ при $B = 20$ Тл (рисунок 2.9б). При $r_0 = 15$ нм рівні енергії $1s_0$ і $1p_0$ зближуються під впливом магнітного поля (рисунок 2.9б), а розподіл густини електронів у цих станах стає подібним. Те ж саме відбувається зі станами $1d_0$ і $1f_0$. Цей ефект було раніше описано в дослідженнях наноструктури $CdSe/ZnS$ [97] та сферичної плівки $CdSe$ [65, 196].

На рисунку 2.9 спостерігається зростання енергії електрона зі збільшенням магнітного поля. Це явище пояснюється обмеженням руху заряджених частинок через параболічний потенціал, який описується третім доданком у квадратних дужках рівняння (2.21). Це свідчить про те, що магнітне поле зміщує електрон до області навколо осі Oz , що призводить до сильнішого обмеження заряджених частинок і порушення сферичної симетрії системи. Наявність мілкої донорної домішки створює потенціал притягання для електронів, який описується четвертим доданком у квадратних дужках рівняння (2.21). Це призводить до зсуву усіх станів з домішкою (суцільні лінії) в область нижчих енергій порівняно з відповідними станами без домішки (штрихові лінії). Найбільш чутливим до впливу домішки є основний стан, що зумовлено його меншою просторовою протяжністю навколо центру структури за відсутності домішки.

Описані особливості енергетичного спектра електронів відображаються в енергіях переходу E^{1s-f} , зображених на рисунку 2.10 для тих самих параметрів системи, які використовувалися для рисунка 2.9. Енергії переходів, згідно з рівнянням (2.27), визначають положення піків ПФД, і, разом з квадратом дипольного моменту переходу $|M_{1s-f}|^2$, впливають на їхню висоту, яка приблизно визначається за допомогою формули

$$\sigma_{if}^0 = \frac{4\pi}{3n_r\Gamma} \beta_{FS} E_b^{if} M_{1s-f}^2. \quad (2.28)$$

При $r_0 = 5$ нм енергетичні криві є майже паралельними одна одній (рисунок 2.9а). Така поведінка є результатом сильного утримання носіїв заряду в області поблизу центру структури, що обумовлено малим значенням параметра r_0 . У цьому випадку магнітне поле діє як легке збурення, що пояснює квазіпостійну поведінку кривих енергії переходу під дією магнітного поля (рисунок 2.10а). Вплив магнітного поля на енергетичні рівні електрона можна посилити збільшуючи радіус ядра r_0 (рисунок 2.9б та 2.10б). Цей ефект проявляється як незначне збурення основного стану і стає значним для високо збуджених станів. Під впливом

магнітного поля ці стани можна легко вивести за межі області квантової ями, яка знаходиться між r_0 і r_1 .

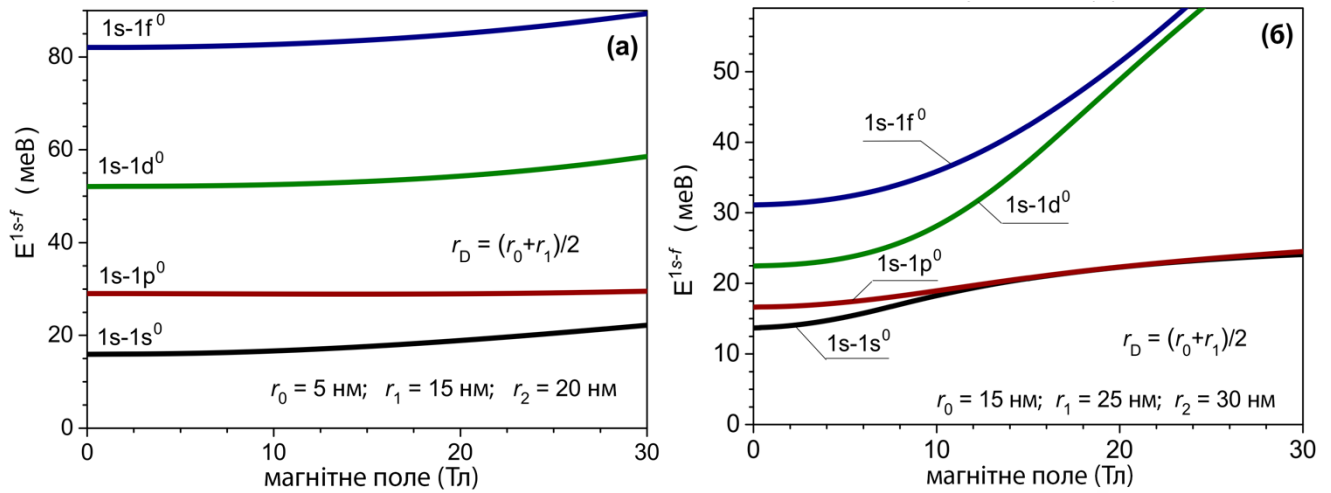


Рисунок 2.10. Залежність енергій електронно-домішкового переходу від прикладеного магнітного поля в наносистемі з $r_0 = 5$ нм, $r_1 = 15$ нм і $r_2 = 20$ нм (а) і $r_0 = 15$ нм, $r_1 = 25$ нм і $r_2 = 30$ нм (б).

На рисунку 2.11 показано матричний елемент $|M_{1s-f}|^2$ як функцію прикладеного магнітного поля в БСКТ $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ для $r_0 = 5$ нм (а) та $r_0 = 15$ нм (б). У разі $r_0 = 5$ нм значення дипольних моментів квантового переходу, які заборонені правилами відбору в системах із сферичною симетрією (M_{1s-1s_0} та M_{1s-1d_0}), є меншими за значення M_{1s-1p_0} . При $r_0 = 15$ нм зі збільшенням напруженості магнітного поля значення M_{1s-1s_0} і M_{1s-1p_0} зростають і зближуються, тоді як значення M_{1s-1d_0} зменшується. Для кращого розуміння поведінки дипольних моментів потрібно спершу розглянути поведінку в просторі ХФ станів, які беруть участь у визначенні їх величини.

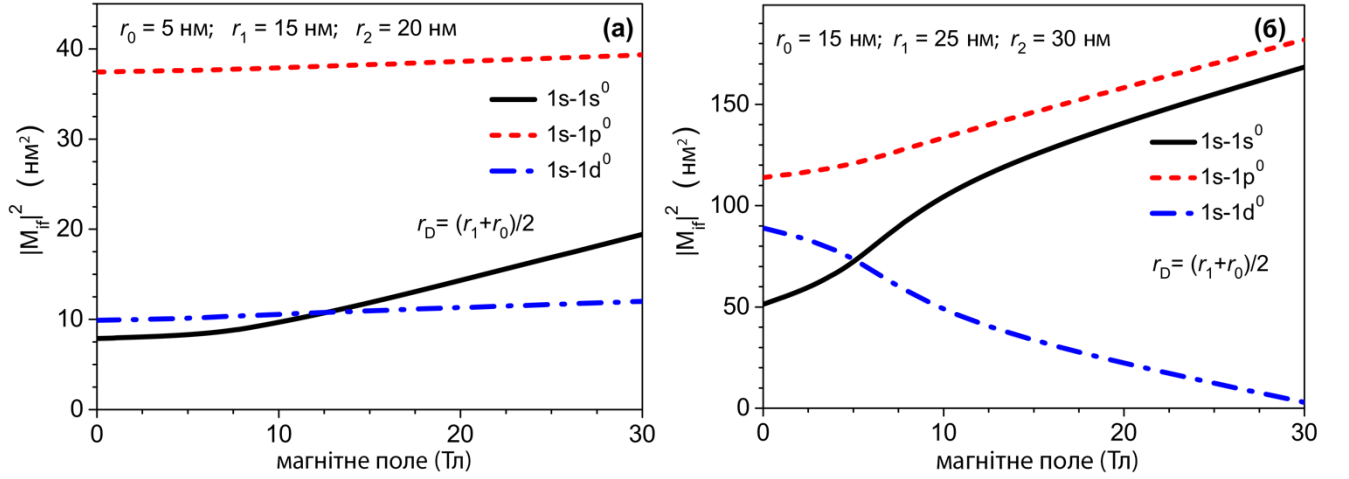


Рисунок 2.11. Залежність дипольного моменту $|M_{1s-f}|^2$ від прикладеного магнітного поля в наносистемі з $r_0 = 5$ нм, $r_1 = 15$ нм і $r_2 = 20$ нм (а) і $r_0 = 15$ нм, $r_1 = 25$ нм і $r_2 = 30$ нм (б).

На рисунку 2.12 представлено розподіл густини ймовірності основного стану електрона (з домішкою та без неї) та ХФ перших двох збуджених станів (без домішки) для кількох значень прикладеного магнітного поля в БСКТ $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$. Результати представлені для наноструктури з радіусами ядра $r_0 = 5$ нм (а) та $r_0 = 15$ нм (б). При цьому враховано, що домішка у випадку стану Ψ_{1s} розташовується вздовж осі Oz у положенні $r_D = (r_0 + r_1)/2$.

Спочатку, за відсутності магнітного поля і домішки, стан Ψ_{1s}^0 для обох структур має сферичну симетрію з парною симетрією щодо площини $z = 0$, максимальна густина ймовірності якого має форму оболонки, розташованої між радіусами r_0 та r_1 . Стан Ψ_{1p}^0 , що має симетрію типу p_z , має два максимуми вздовж осі Oz з непарною симетрією відносно площини $z = 0$. Третій стан, Ψ_{1d}^0 , є парною функцією відносно площини $z = 0$ та має два максимуми у напрямку осі Oz та максимум на площині $\theta = \frac{\pi}{2}$ з протилежним знаками щодо максимумів уздовж Oz .

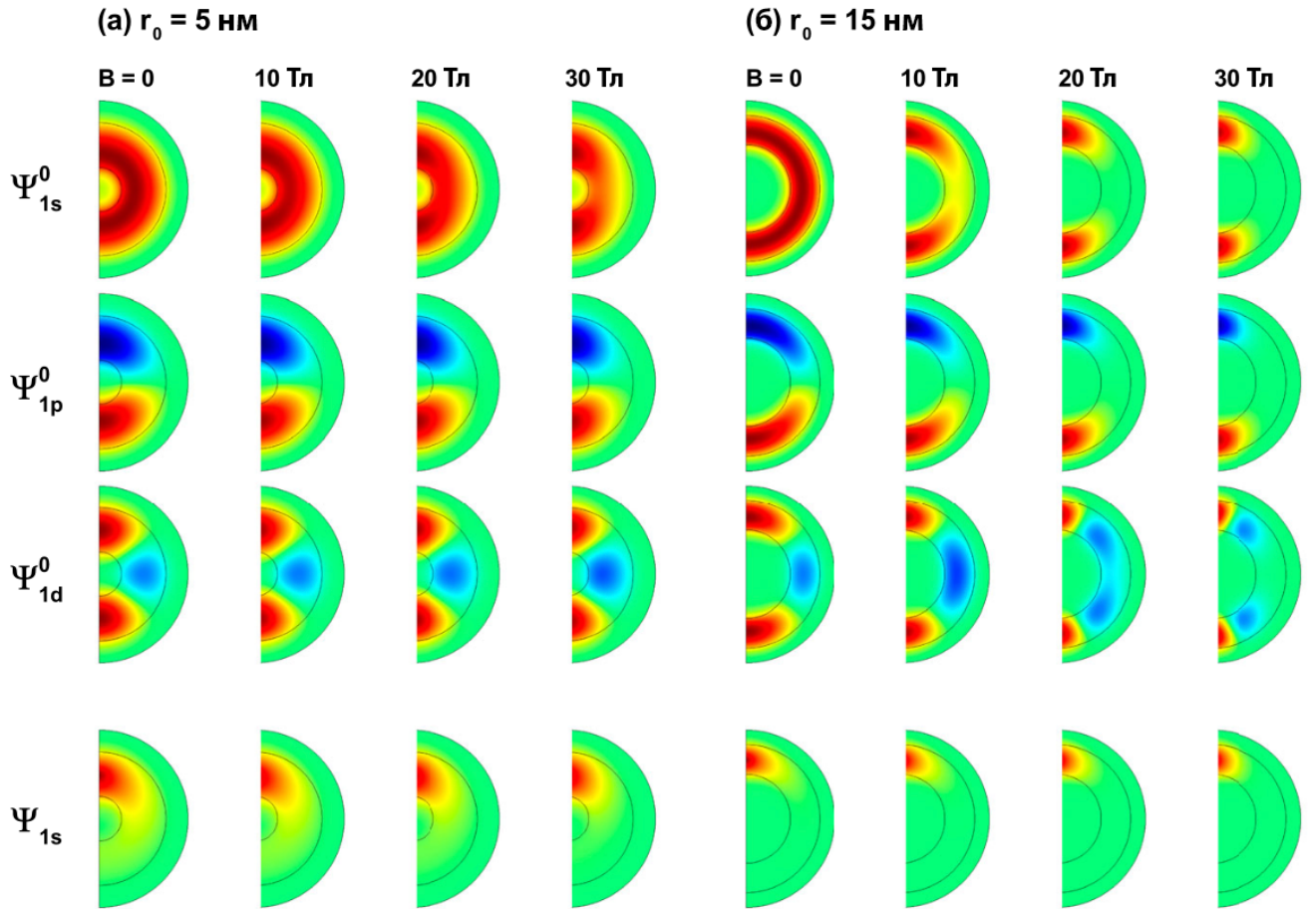


Рисунок 2.12. Розподіл густини ймовірності хвильових функцій Ψ_{1s}^0 , Ψ_{1p}^0 , Ψ_{1d}^0 і Ψ_{1s} для кількох значень прикладеного магнітного поля в БСКТ $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$. Кольорове позначення розподілу густини ймовірності: червоний колір відповідає максимальному додатному значенню, синій – максимальному від’ємному значенню, а зелений – нульовому значенню.

При ввімкненні магнітного поля сферична симетрія порушується, що добре видно для стану Ψ_{1s}^0 при $B \neq 0$ для обох розглянутих структур. У цьому випадку також спостерігається збільшення максимуму густини ймовірності збуджених станів. У випадку структури з радіусом $r_0 = 15$ нм, ХФ Ψ_{1s}^0 і Ψ_{1p}^0 стають схожими (звичайно, перша/друга з парною/непарною симетрією відносно площини $z = 0$) через виродження основного стану при великих магнітних полях, що зображено на рисунку 2.12б. При сильних магнітних полях, таких як $B = 30$ Тл, максимум

густини ймовірності для стану Ψ_{1d}^0 , що спостерігався при $\theta = \frac{\pi}{2}$ за відсутності поля, перетворюється на два максимуми густини ймовірності при $\theta = \frac{\pi}{4}$ та $\theta = \frac{3\pi}{4}$. Аналіз стану Ψ_{1s} у присутності магнітного поля (четвертий рядок на рисунку 2.12) показує значне порушення сферичної симетрії, з максимальною густиною ймовірності, що зосереджена біля центру домішки. Ця густина є більш локалізованою для структури з великим розміром. ХФ, зображені на рисунку 2.12, були отримані шляхом розрахунку методом скінченних елементів [197–200].

Аналіз ХФ допомагає краще зрозуміти поведінку дипольного моменту, що представлено на рисунку 2.11. З рисунка видно, що у всіх випадках значення $|M_{1s-1p_0}|^2$ перевищує $|M_{1s-1s_0}|^2$ та $|M_{1s-1d_0}|^2$. Це пояснюється тим, що стан Ψ_{1p}^0 має один максимум, який точно збігається з положенням максимуму густини ймовірності стану Ψ_{1s} , що призводить до більшого перекриття між ХФ. На рисунку 2.11а $|M_{1s-1s_0}|^2$ є найбільш чутливим до ефектів магнітного поля, оскільки зі збільшенням напруженості магнітного поля густина ймовірності для стану Ψ_{1s}^0 збільшується у напрямку осі Oz . На рисунку 2.11б, зростання $|M_{1s-1s_0}|^2$ та $|M_{1s-1p_0}|^2$ також обумовлене концентрацією густини у напрямку осі Oz під впливом магнітного поля, особливо в області, де розташована домішка. Спад $|M_{1s-1d_0}|^2$ на рисунку 2.11б пояснюється зменшенням максимумів густини ймовірності для стану Ψ_{1d}^0 уздовж осі Oz . Можна відмітити, що дипольні моменти на рисунку 2.11б значно більші, ніж на малюнку 2.11а. Це пояснюється тим, що для більшої структури змінна z має більший вплив на розрахунок дипольного моменту, ніж у випадку малих розмірів наноструктури.

На рисунку 2.13 наведені результати розрахунку залежностей ПФД від енергії падаючого фотона для різних положень домішки та двох розмірів ядра БСКТ. На кожному зображенні 2.13 розглянуто три значення прикладеного магнітного поля.

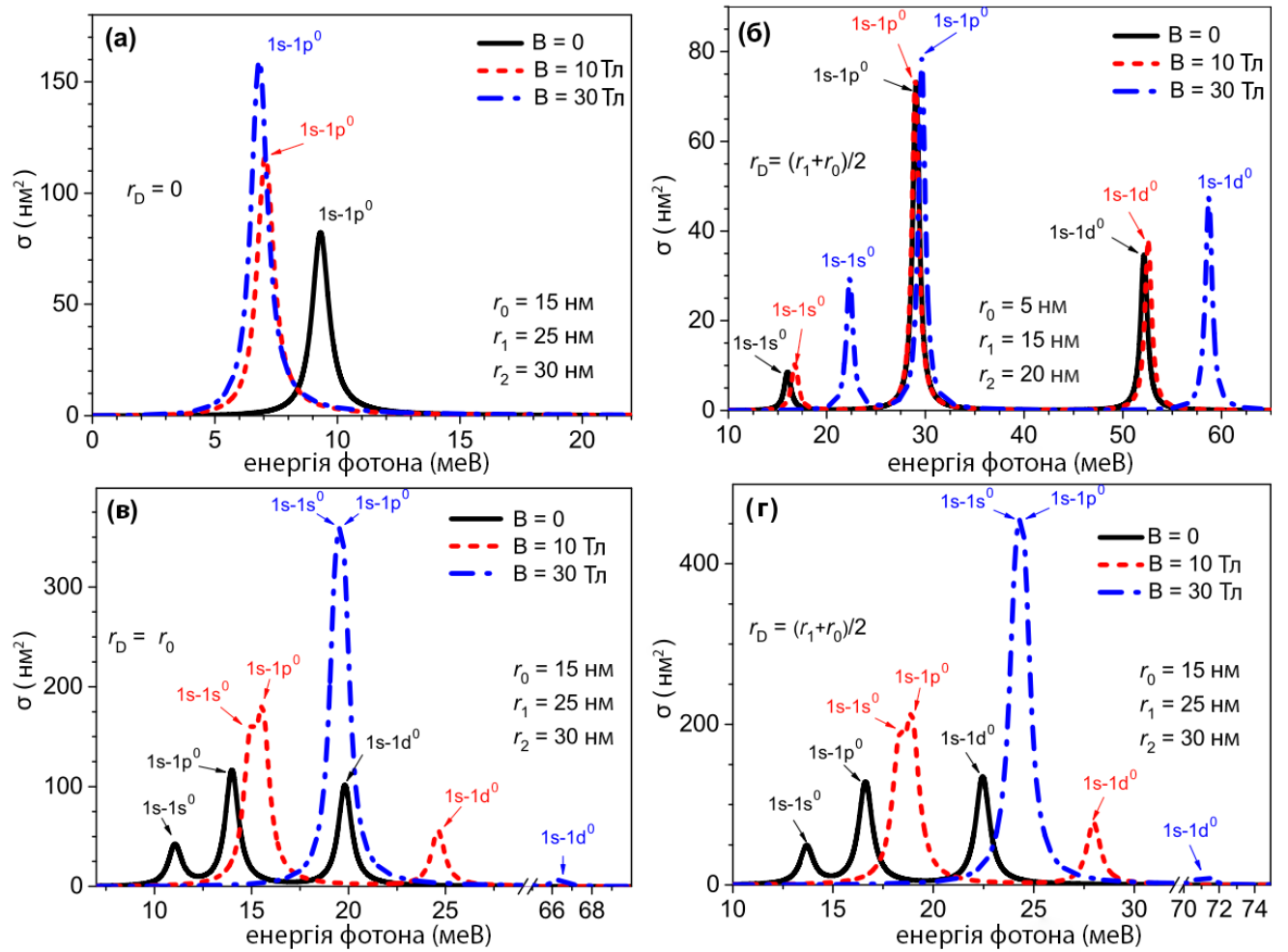


Рисунок 2.13. Залежності ПФД від енергії фотона для наноструктур з $r_0 = 15\text{ нм}$ (а, в, г), $r_0 = 5\text{ нм}$ (б) і $r_D = 0$ (а), $r_D = r_0$ (в), $r_D = (r_0 + r_1)/2$ (б, г) при $B = 0; 10; 30\text{ Тл}$.

У випадку центральної домішки (рисунок 2.13а), через правила відбору ($|\Delta l| = 1$) існує лише пік $1s - 1p_0$, висота якого зростає зі збільшенням напруженості магнітного поля, а його положення зміщується в область менших енергій. Це зміщення резонансних піків в низкоенергетичну область є результатом зниження енергії переходу E_{1s-1p_0} . Як було зазначено раніше, враховуючи p_z -подібну симетрію стану Ψ_{1p}^0 , дипольний момент зростає зі збільшенням магнітного поля. Таким чином, враховуючи, що $\sigma_{1s-1p_0} \sim E^{1s-1p_0} \times M_{1s-1p_0}^2$, результати на рисунку 2.13а чітко показують, що вплив дипольного моменту на величину ПФД домінує над впливом енергії переходу.

При наявності нецентральної домішки на рисунках 2.13(б-г) з'являються три піки ПФД σ_{if}^0 , які відповідають переходам $1s - 1s_0$, $1s - 1p_0$ та $1s - 1d_0$. Вони пов'язані з ненульовими значеннями дипольного моменту, що наведені на рисунку 2.11. На рисунках 2.10а та 2.10б видно, що в присутності прикладеного магнітного поля всі енергії переходів зміщуються в область вищих енергій. Це зміщення є малопомітним для КТ з $r_0 = 5$ нм (рисунок 2.10а), але добре вираженим для КТ з $r_0 = 15$ нм (рисунок 2.10б). Цей ефект призводить до зсуву всіх піків ПФД в область вищих енергій. Оскільки величина резонансних піків пропорційна добутку відповідних енергій переходу та дипольного моменту, то з урахуванням наявності магнітного поля їх значення будуть збільшуватись. Це стосується всіх переходів, показаних на рисунках 2.13б та 2.13г, для яких дипольні моменти квантових переходів також є зростаючими функціями магнітного поля, за винятком переходу $1s - 1d_0$, дипольний момент якого зменшується приблизно на 100% при збільшенні поля від $B = 0$ до $B = 30$ Тл.

Для наносистеми з $r_0 = 15$ нм (рисунки 2.13в і 2.13г), піки, що відповідають переходам $1s - 1s_0$ і $1s - 1p_0$, зливаються в один більший, висота якого зростає зі збільшенням напруженості магнітного поля. Водночас висота піку, пов'язаного з переходом $1s - 1d_0$, зменшується зі збільшенням магнітного поля, віддаляючись від двох попередніх піків. Порівнюючи два можливі положення домішок $r_D = (r_0 + r_1)/2$ і $r_D = r_0$ (рисунок 2.13в і 2.13г), стає зрозуміло, що кулонівська взаємодія електрон-домішка більша в першому випадку. Для домішки при $r_D = (r_0 + r_1)/2$ електростатична взаємодія діє в трьох напрямках простору, тоді як для $r_D = r_0$ потенціальний бар'єр зміщує електронну густину ймовірності від центру домішки, що призводить до збільшення відстані між електроном і домішкою і, відповідно, до зменшення енергії переходу основного стану. Таким чином, переміщення домішки від $r_D = (r_0 + r_1)/2$ до $r_D = r_0$ послаблює електростатичний вплив на основний стан, що знижує енергію всіх переходів. Це пояснює, чому на рисунку 2.13в усі піки ПФД зміщені в область нижчих енергій порівняно з відповідними піками на

рисунку 2.13г.

2.2.3. Порівняння матричного методу і методу скінченних елементів для обчислення енергетичного спектру електрона

Для підтвердження попередніх результатів було виконано розрахунок впливу магнітного поля на електронні стани для меншої структури, як за відсутності, так і за наявності домішки, враховуючи різні значення квантового числа m , із застосуванням двох різних методів. На рисунку 2.14 наведено порівняння результатів, отриманих матричним методом, описаним у теоретичній частині, та методом скінченних елементів із використанням комерційного програмного забезпечення COMSOL-Multiphysics. На рисунку 2.14а показані результати без врахування домішок, тоді як на рисунку 2.14б домішка включена та локалізована в центрі потенціальної ями $r_D = (r_0 + r_1)/2$. Лінії відповідають енергіям отриманим матричним методом, а заповнені символи — результати отримані методом скінченних елементів.

Із рисунка 2.14 видно, що результати обчислень мають надзвичайно високу відповідність. По суті, обидва методи обчислень генерують однакові енергетичні спектри. У випадку обчислень за допомогою методу скінченних елементів було використано вільну трикутну сітку з 6016 трикутниками, 336 елементами ребер і 10 елементами вершин. Мінімальна/середня якість кожного елемента становила 0.4593/0.7571, а співвідношення площі елементів — 0.1803. Максимальний/мінімальний розмір елемента був 7.8/0.36, коефіцієнт кривизни — 0.6, максимальна швидкість росту елемента — 1.5, а роздільна здатність вузьких областей — 1.

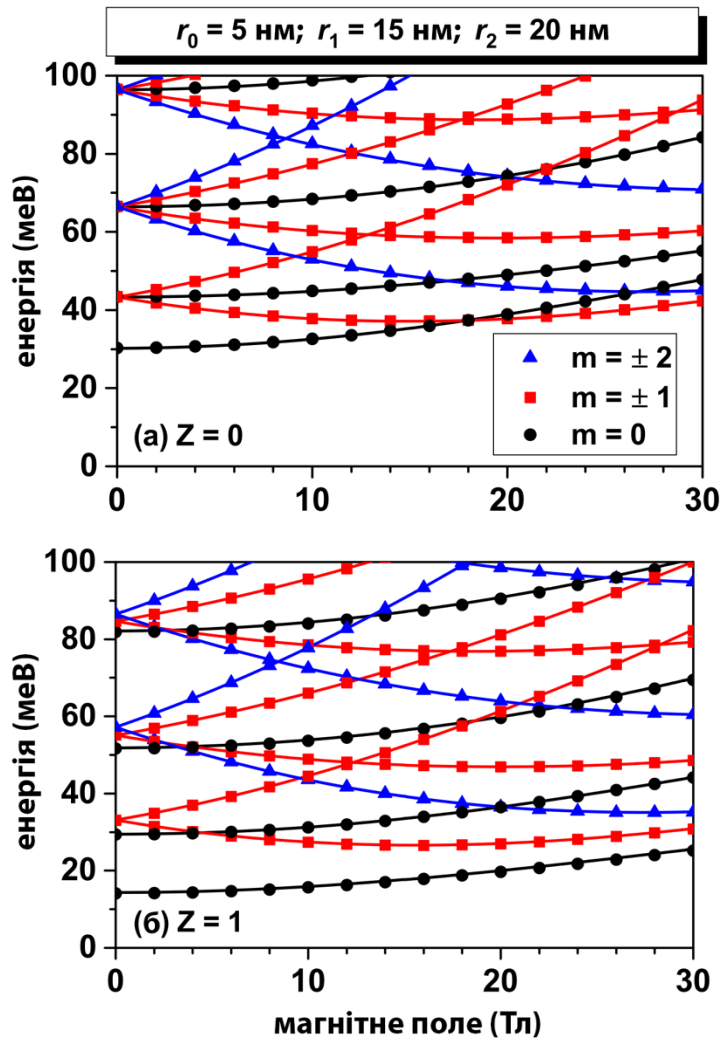


Рисунок 2.14. Залежність енергетичного спектру електрона від прикладеного магнітного поля в БСКТ $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ з $r_0 = 5\text{нм}$, $r_1 = 15\text{нм}$ і $r_2 = 20\text{нм}$.

Далі розглянуто переваги і недоліки використання методу скінченних елементів. За відсутності домішок і магнітних полів задача для електрона, утримуваного в КТ зі скінченним потенціалом обмеженням, має точне рішення. Щоб перевірити метод скінченних елементів, були проведені розрахунки енергетичного спектра електрона, обмеженого в КТ, використовуючи трикутну сітку з 6016 елементами. У цьому випадку чисельні результати узгоджуються з точним рішенням до 0,0001 меВ. За допомогою тієї ж сітки було досягнуто збіжності результатів у присутності мілкої донорної домішки. Крім того, коли

розглядається система з домішкою, метод скінченних елементів дає змогу уточнити сітку в області, що оточує домішку, для кращого врахування кулонівської взаємодії між домішкою та електронном. Загалом, при порівнянні розрахунків, отриманих матричним методом і методом скінченних елементів, останній дає ті ж самі результати, але за час, що в 10 разів менший, використовуючи ті ж обчислювальні ресурси і операційну систему. У результаті було виявлено, що метод скінченних елементів є потужним інструментом для моделювання напівпровідникових гетероструктур низької розмірності з різноманітними і складними формами. Окрім цього, можна враховувати такі ефекти, як зовнішні електричні та магнітні поля, інтенсивне нерезонансне лазерне випромінювання тощо.

Таким чином, було досліджено вплив магнітного поля та розташування мілкої донорної домішки на ПФД у БСКТ. Показано, що у випадку центральної домішки магнітне поле зміщує пік ПФД у низькоенергетичну область. У разі нецентральної домішки залежність ПФД від енергії фотона містить кілька піків, що відповідають внутрішньозонним квантовим переходам. Крім того, при збільшенні розміру ядра наноструктури два найнижчі піки зливаються, що призводить до збільшення максимуму ПФД. Ця особливість впливу магнітного поля на ПФД може бути використана в різних оптоелектронних пристроях. Результати енергій та ХФ були отримані за допомогою матричного методу з використанням ортонормованого базису, який отримується із системи без впливу магнітного поля та домішок. Для підтвердження цих результатів також було проведено розрахунок енергетичного спектру електрона методом скінченних елементів, і отримані дані з високою точністю збіглися з результатами, отриманими матричним методом.

2.3. Вплив магнітного поля на коефіцієнт поглинання та поперечний переріз фотоіонізації домішки у двоямній багатошаровій сферичній квантовій точці

2.3.1. Розв'язок рівняння Шредінгера для електрона у багатошаровій сферичній квантовій точці з двома потенціальними ямами

Досліджено БСКТ яка складається зі сферичного ядра $GaAs$ і двох сферичних оболонок ($Al_xGa_{1-x}As$ і $GaAs$), розміщену у широкозонному середовищі. Радіус ядра позначено як r_0 , а товщини сферичних шарів — як Δ_1 і Δ_2 . Ядро БСКТ і зовнішня сферична оболонка утворюють дві потенціальні ями для електрона, тоді як внутрішній шар виступає потенціальним бар'єром висотою V . Донорна водневоподібна домішка знаходиться в центрі ядра наноструктури. Схематичне зображення потенціальної енергії розмірного квантування електрона в БСКТ наведене на рисунку 2.15.

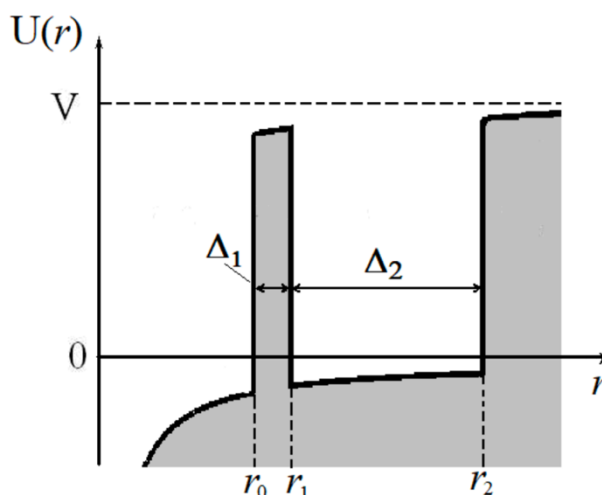


Рисунок 2.15. Потенціальна схема БСКТ $GaAs/Al_xGa_{1-x}As /GaAs$.

Рівняння Шредінгера для електрона має вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{\mu(r)} \vec{\nabla} \Psi_{nlm}(\vec{r}) + \left[U(r) - \frac{Ze^2}{\varepsilon(r)r} \right] \Psi_{nlm}(\vec{r}) = E_{nl} \Psi_{nlm}(\vec{r}) \quad (2.29)$$

де координатні залежності ефективної маси, діелектричної проникності та потенціальної енергії виражені у вигляді

$$\mu(r) = m_e \begin{cases} m_0, & r \leq r_0, \quad r_1 < r \leq r_2, \\ m_1, & r_0 < r \leq r_1 \end{cases}, \quad (2.30)$$

тут m_e — маса вільного електрона,

$$\varepsilon(r) = \begin{cases} \varepsilon_0, & r \leq r_0, \quad r_1 < r \leq r_2, \\ \varepsilon_1, & r_0 < r \leq r_1 \end{cases}, \quad (2.31)$$

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq r_0, \quad r_1 < r \leq r_2 \\ V, & r_0 < r \leq r_1 \\ \infty, & r \geq r_2 \end{cases}. \quad (2.32)$$

Перетворивши рівняння (2.29) у безрозмірну форму, використовуючи енергію Рідберга $R_y = m_e e^4 / 2\hbar^2$ як одиницю енергії та борівський радіус $a_B = \hbar^2 / m_e e^2$ як одиницю довжини, а також враховуючи сферичну симетрію задачі, рівняння для радіальної частини ХФ при $r \leq r_0$ та $r_1 < r \leq r_2$ виражається наступним чином

$$-\frac{1}{m_0} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{nl}(r) - \frac{2Z}{\varepsilon_0 r} R_{nl}(r) = E_{nl} R_{nl}(r), \quad (2.33)$$

а при $r_0 < r \leq r_1$

$$-\frac{1}{m_1} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{nl}(r) + \left(V - \frac{2Z}{\varepsilon_0 r} \right) R_{nl}(r) = E_{nl} R_{nl}(r). \quad (2.34)$$

Розв'язки (2.33) і (2.34) містять вироджені гіпергеометричні функції 1-го і 2-го роду $F(a, b, z)$ і $G(a, b, z)$:

$$R_{nl} =$$

$$= \begin{cases} A_0 e^{-\frac{\xi_0 r}{2}} r^l F(l+1-\eta_0, 2l+2, \xi_0 r), & r \leq r_0 \\ A_1 e^{-\frac{\xi_1 r}{2}} r^l [F(l+1-\eta_1, 2l+2, \xi_1 r) + B_1 G(l+1-\eta_1, 2l+2, \xi_1 r)], & r_0 < r \leq r_1 \\ A_2 e^{-\frac{\xi_2 r}{2}} r^l [F(l+1-\eta_0, 2l+2, \xi_0 r) + B_2 G(l+1-\eta_0, 2l+2, \xi_0 r)], & r_1 < r \leq r_2 \end{cases} \quad (2.35)$$

де

$$\xi_0 = -2 \operatorname{sign}(E_{nl}) \sqrt{m_0(-E_{nl})}, \quad \eta_0 = \frac{2Zm_0}{\varepsilon_0 \xi_0}, \quad (2.36)$$

$$\xi_1^{e,h} = 2 \operatorname{sign}(V - E_{nl}) \sqrt{m_1(V - E_{nl})}, \quad \eta_1 = \frac{2Zm_1}{\varepsilon_1 \xi_1}, \quad (2.37)$$

тут $\operatorname{sign}(x)$ – знакова функція, яка забезпечує єдину аналітичну форму ХФ для станів з різними знаками енергії електронів. Невідомі коефіцієнти та енергетичний спектр визначаються з граничних умов Бена-Деніела-Дьюка [166]. Енергію зв’язку електрона і домішки в стані (nl) можна отримати у вигляді $E_{nl}^b = E_{nl}^{Z=0} - E_{nl}^{Z=1}$. На основі енергетичного спектру та хвильових функцій ПФД обчислюється за формулою

$$\sigma(\hbar\omega) = \frac{4\pi^2}{3n_r} \left(\frac{F_{eff}}{F_0} \right)^2 \beta_{FS} \hbar\omega \sum_n |\langle R_{n1}^{Z=0} | r | R_{10}^{Z=1} \rangle|^2 \delta(E_{n1} - E_{10} - \hbar\omega) \quad (2.38)$$

де $\delta(E) = \Gamma[\pi(E^2 + \Gamma^2)]^{-1}$, $\hbar\omega$ – енергія фотона, n_r – показник заломлення, $\beta_{FS} = 1/137$ – постійна тонкої структури, відношення $F_{eff}/F_0 \approx 1$, $\Gamma = 0.4$ меВ. Коефіцієнт оптичного поглинання розраховано для БСКТ з домішкою ($Z = 1$) та без неї ($Z = 0$), використовуючи формулу [164]

$$\alpha(\hbar\omega) = 4\pi\beta_{FS} \sum_n \frac{|\langle R_{n1} | r | R_{10} \rangle|^2 \rho \hbar\omega \hbar\Gamma_0}{(E_{n1} - E_{10} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_0)^2}, \quad (2.39)$$

де $\rho = 1/V$ це густина носіїв заряду в БСКТ, $\Gamma_0 = 1/\tau_0$, де $\tau_0 = 0.14ps$ це час релаксації [164].

Для дослідження впливу магнітного поля на коефіцієнта оптичного поглинання треба розв'язати рівняння Шредінгера

$$\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\frac{1}{2\mu(\vec{r})}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\psi_f(\vec{r}) + \left[U(r) - \frac{Ze^2}{\varepsilon(r)r}\right]\psi_f(\vec{r}) = E_f\psi_f(\vec{r}). \quad (2.40)$$

Для розв'язку рівняння (2.40) було використано матричний метод [69, 196], де ХФ розкладаються по повному набору точних функцій, отриманих в наносистемі без впливу магнітного поля та домішок

$$\psi_{jm}(\vec{r}) = \sum_{n,l} c_{nl}^{jm} \psi_{nlm}(\vec{r}), \quad (2.41)$$

де $\psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$.

Для визначення коефіцієнтів C_{nl}^{jm} та енергетичного спектра електронів розв'язується секулярне рівняння $|H_{nl,n'l'} - E_{jm}\delta_{n,n'}\delta_{l,l'}| = 0$. Тут власні значення (E_{jm}) і власні вектори (C_{nl}^{jm}) матриці $H_{nl,n'l'}$ визначають енергетичний спектр і ХФ електрона в БСКТ під впливом магнітного поля [69].

2.3.2. Чисельний аналіз впливу магнітного поля, домішки та ширин потенціальних ям на оптичні властивості електрона

У чисельних розрахунках використано такі фізичні параметри БСКТ [201]: $x = 0,3$, $m_0 = 0,067$, $m_1 = 0,092$, $\varepsilon_0 = 13,18$, $\varepsilon_1 = 12,24$, $V = 248$ меВ, $r_0 = 10$ нм, $r_1 = 12$ нм, $\Delta_1 = 2$ нм.

Залежність енергетичного спектра електрона в БСКТ від ширини зовнішньої оболонки Δ_2 наведена на рисунку 2.16. При малих значеннях Δ_2 ($\Delta_2 < r_0$), за відсутності домішок (рисунк 2.16б), електрон локалізується в ядрі КТ, що відповідає горизонтальній ділянці залежності $E_{10}(\Delta_2)$, а при $\Delta_2 > r_0$ електрон

переміщується у зовнішню потенціальну яму, де його енергія знижується. Зміна локалізації електрона відбувається в області антикросингу рівнів енергії E_{10} і E_{20} при $\Delta_2 \sim 10$ нм. За наявності домішок (рисунк 2.16а) область антикросингу зсувається до $\Delta_2 \sim 14$ нм.

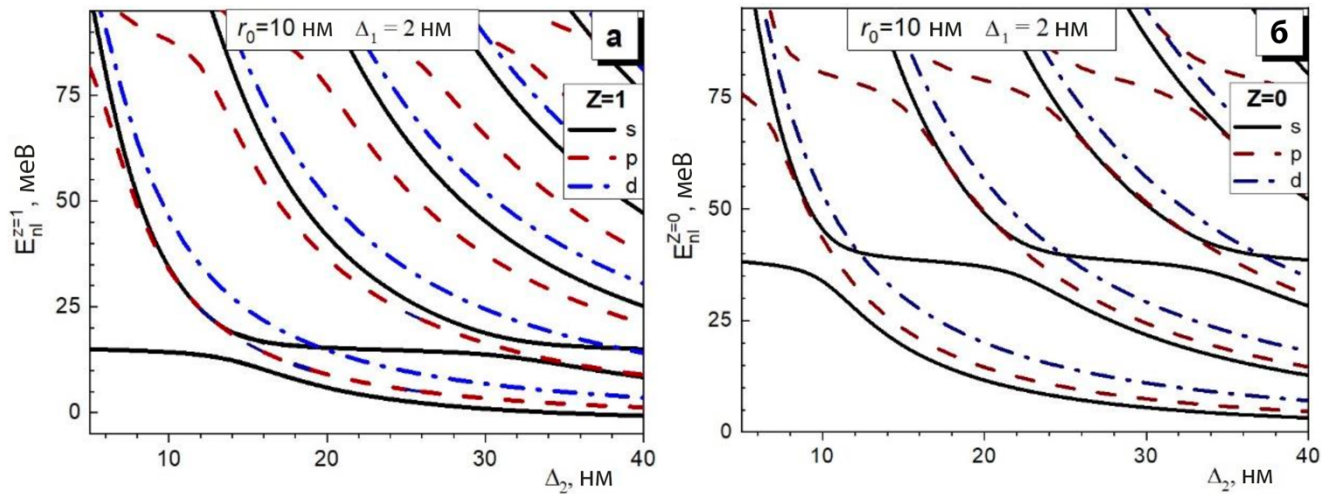


Рисунок 2.16. Залежність енергетичного спектра електрона від ширини зовнішньої потенціальної ями Δ_2 з $r_0 = 10$ нм і $\Delta_1 = 2$ нм при $Z = 1$ (а) та $Z = 0$ (б).

На рисунку 2.17 представний радіальний розподіл густини електронів $w(r) = |R_{nl}(r)|^2 r^2$ в основному стані $1s$ та збуджених станах $1p$ і $2p$. Розміри зовнішньої потенціальної ями вибрано так, щоб відповідали початку ($\Delta_2 = 12$ нм) і кінцю ($\Delta_2 = 18$ нм) області антикросингу, оскільки це дозволяє продемонструвати особливості перерозподілу електронної густини під впливом цього ефекту.

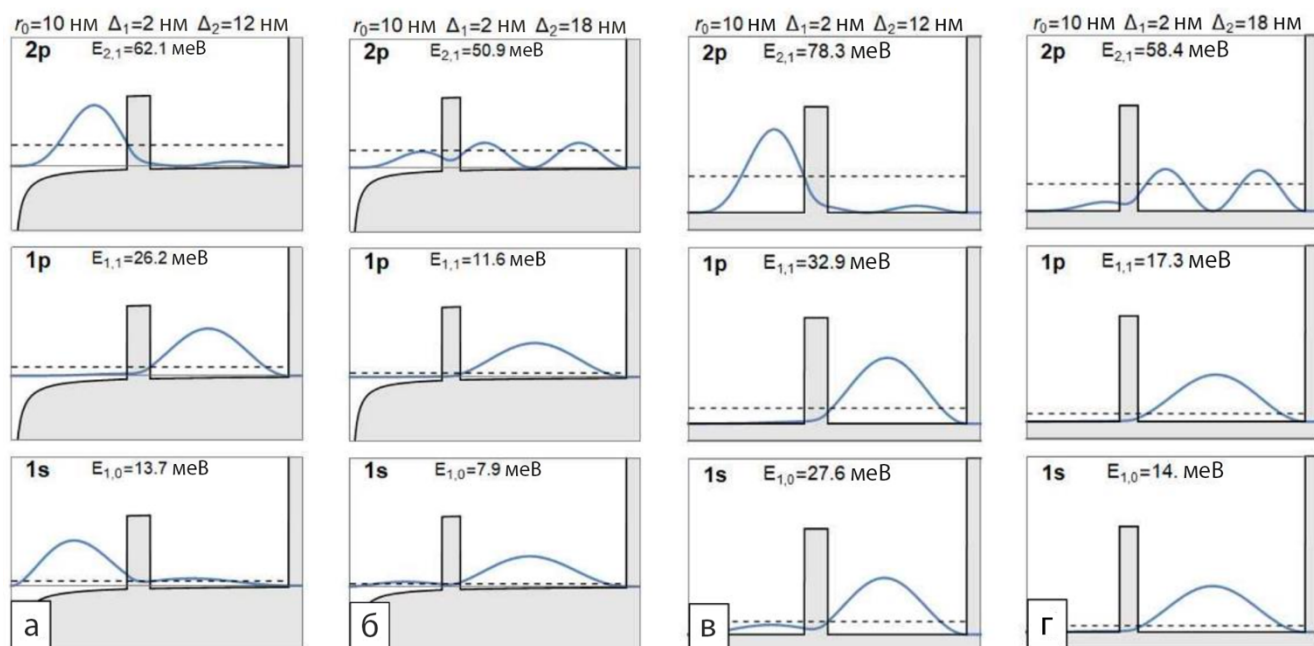


Рисунок 2.17. Радіальний розподіл густини електронів у станах $1s$, $1p$, $2p$ при $Z = 0$ (а, б) та $Z = 1$ (в, г).

Енергію зв'язку електрона з домішкою можна оцінити порівнюючи значення енергій відповідних станів у наносистемі з домішками та без них. На рисунку 2.18 наведена енергія зв'язку електрона з домішкою в s та p станах як функція ширини зовнішньої оболонки КТ.

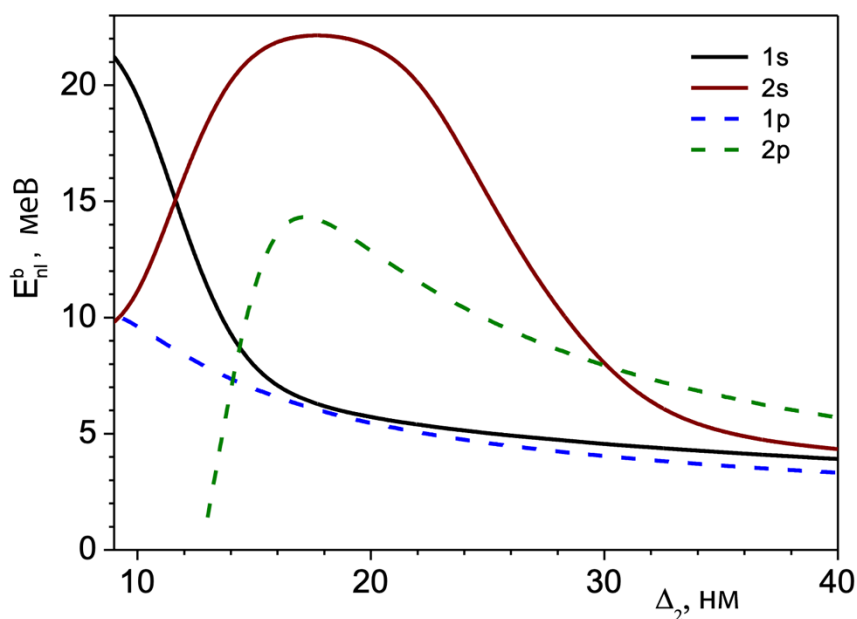


Рисунок 2.18. Залежність енергії зв'язку від Δ_2 в електронних станах $1s$, $2s$, $1p$, $2p$.

Енергії зв'язку електрона з домішкою набувають максимального значення коли електрон локалізований в ядрі наносистеми. У зонах антикросингу рівнів енергії E_{10} і E_{20} , а також E_{11} і E_{21} , відповідні залежності енергії зв'язку перетинаються. Енергія зв'язку в p станах є нижчою ніж у s станах через зміщення електронної густини від центру наносистеми внаслідок відцентрового члена в гамільтоніані.

На рисунку 2.19 показані енергетичні залежності ПФД домішки $\sigma(\hbar\omega)$ при різних значеннях ширини зовнішньої потенціальної ями КТ Δ_2 . З рисунка помітно, що при $\Delta_2 = 20$ нм основний внесок у ПФД забезпечує квантовий перехід $1s - 1p^0$, що підтверджується перекриттям відповідних ХФ (рисунки 2.17б, 2.17г). Зі зменшенням ширини зовнішньої потенціальної ями електрон у станах $1s$ і $2p^0$ локалізується в ядрі. Через це величина першого піка ПФД $1s - 1p^0$ зменшується, тоді як інтенсивність другого піка ПФД, що відповідає квантовому переходу $1s - 2p^0$, збільшується. Крім того, зі зменшенням Δ_2 , всі піки ПФД зміщуються в область вищих енергій.

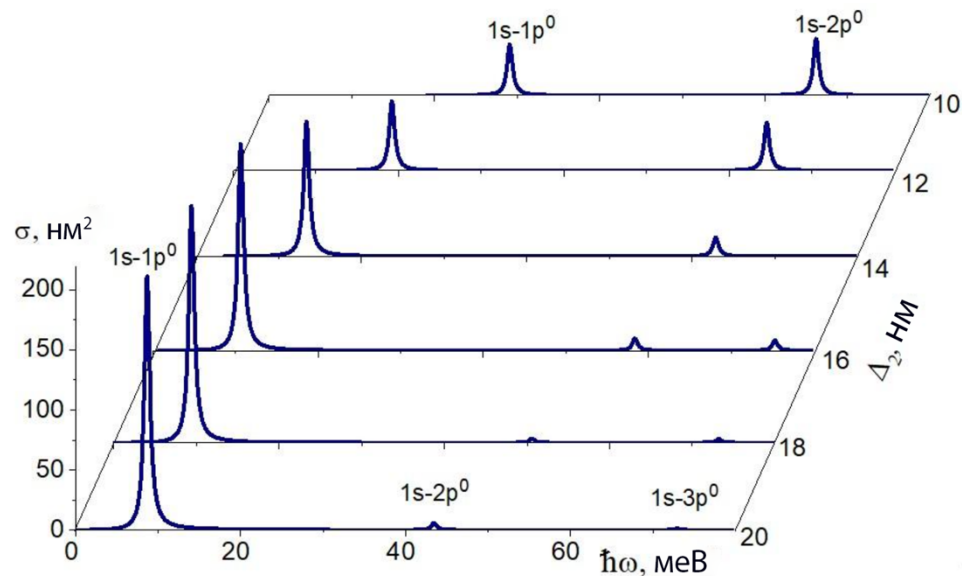


Рисунок 2.19. Залежність ПФД домішки від енергії фотона при різних значеннях ширини зовнішньої потенціальної ями Δ_2 .

На рисунку 2.20 наведена залежність КП від енергії фотона $\alpha(\hbar\omega)$ при різних

значеннях ширини зовнішньої потенціальної ями. Вираз для КП, на відміну від ПФД, включає дипольний момент квантового переходу між станами за наявності домішки або за відсутності домішки. Якісна поведінка піків КП при зменшенні значення Δ_2 дещо схожа на поведінки ПФД, тобто спостерігається їх зміщення в область вищих енергій і збільшення їх значення для вищих збуджених станів. Зі збільшенням ширини зовнішньої потенціальної ями, у відсутності домішки, перший пік КП зростає, тоді як за наявності домішки у наносистемі цей пік поглинання зменшується і стає меншим за пік, що відповідає переходу в другий збуджений стан $2p$.

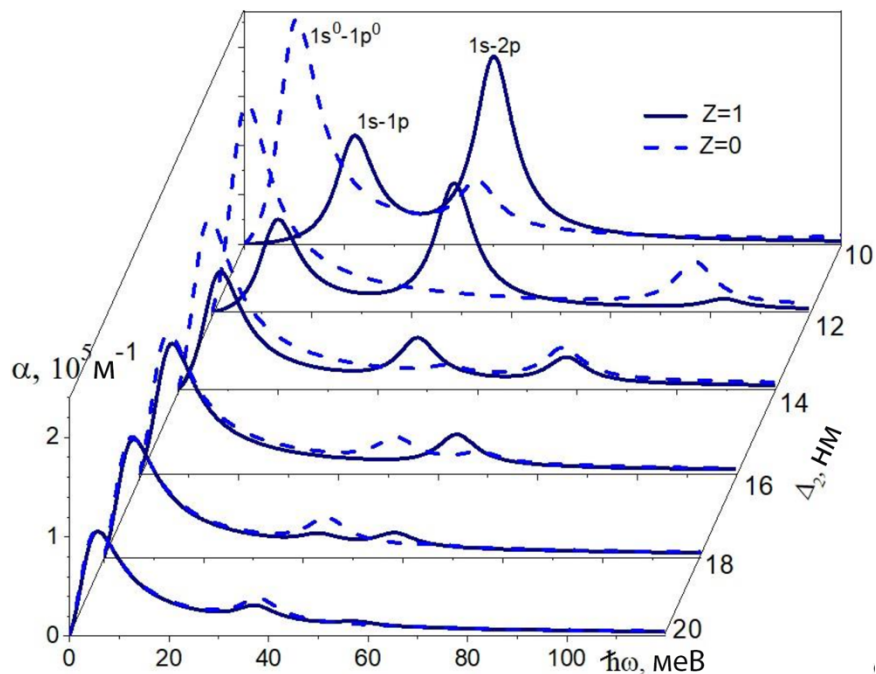


Рисунок 2.20. Залежності КП від енергії фотона при різних значеннях ширини зовнішньої потенціальної ями Δ_2 .

Отримані зміни в залежності ПФД домішки $\sigma(\hbar\omega)$ та КП $\alpha(\hbar\omega)$ від енергії фотона, викликані зменшенням ширини зовнішньої потенціальної ями, дозволяють прогнозувати вплив зовнішнього постійного магнітного поля на оптичні характеристики БСКТ. Збільшення індукції магнітного поля зменшує циклотронний радіус електрона $r = \sqrt{\frac{2\hbar}{eB}}$. Якщо цей радіус стає меншим за радіус

БСКТ, магнітне поле приведе до збільшення обмеження та зменшення ефективної ширини потенціальної ями в напрямку, перпендикулярному до магнітного поля. Зміна локалізації електронів із заданими розмірами БСКТ вимагає індукції магнітного поля близько 10-15 Тл ($r \approx 90\sqrt{B}$ нм).

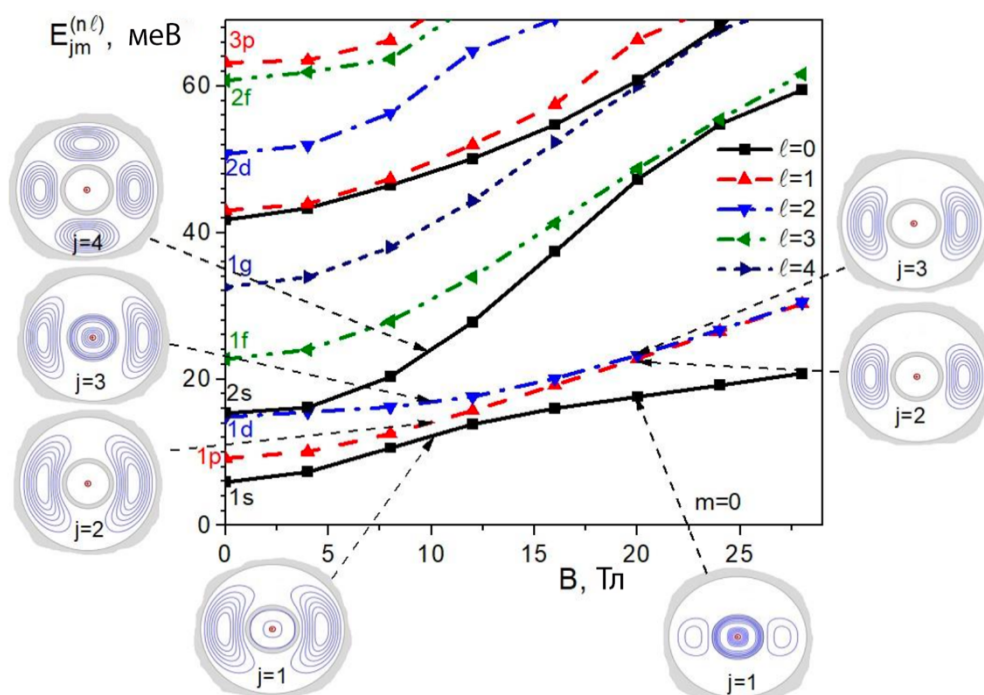


Рисунок 2.21. Залежність енергетичного спектра електронів від індукції магнітного поля ($Z = 1$).

Вплив магнітного поля на енергетичний спектр електронів у БСКТ з центральною домішкою (при $m = 0$) показано на рисунку 2.21. Розподіли густини ймовірності знаходження електрона у наноструктурі наведені для значень напруженості магнітного поля $B = 10$ Тл і $B = 20$ Тл. З рисунка видно, що енергії всіх електронних станів зростають із зростанням індукції магнітного поля. Подібна поведінка енергії спостерігається також при зменшенні ширини зовнішньої потенціальної ями (рисунку 2.16).

Вплив магнітного поля на КП БСКТ з домішкою (при $m = 0$) показано на рисунку 2.22. З рисунка можна побачити, що зі збільшенням магнітного поля пік

поглинання, який відповідає переходу $1s - 1p$ стає нижчим, тоді як пік, пов'язаний із переходом $1s - 2p$, підвищується. Подібна ситуація спостерігається на рисунку 2.20, де зображено залежність КП від ширини зовнішньої потенціальної ями.

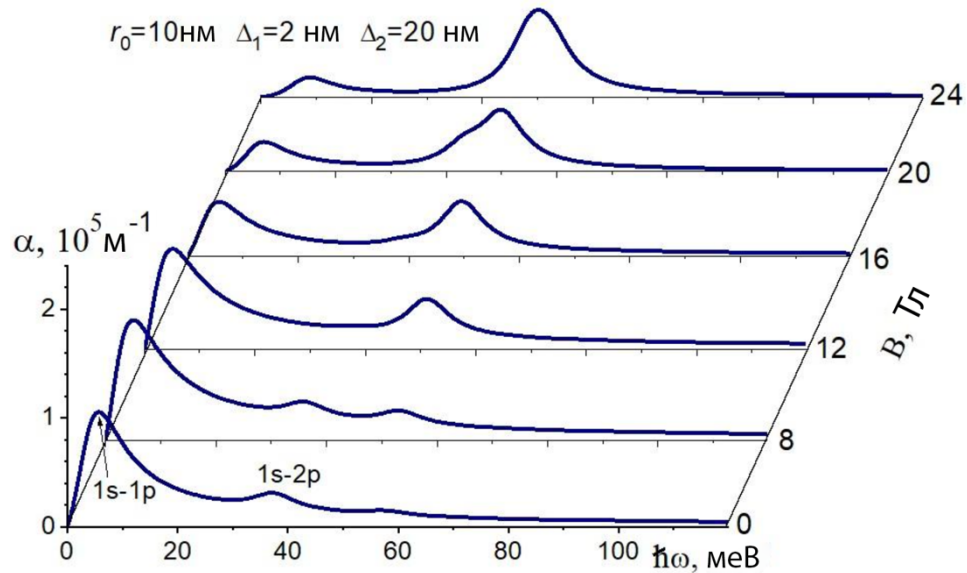


Рисунок 2.22. Еволюція спектральної залежності КП світла в магнітному полі ($Z = 1$).

Отже, матричним методом було розв'язано рівняння Шредінгера для електрона у двоямній БСКТ $GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ з центральною домішкою. ПФД домішки та КП були досліджені для КТ з різними розмірами зовнішньої потенціальної ями та при різних значеннях напруженості магнітного поля. Показано, що оптичні характеристики наносистеми є найбільш чутливими до впливу домішок і зовнішніх полів в області антикросингу енергетичних рівнів. Зменшення розміру зовнішньої потенціальної ями в БСКТ призводить до зміщення піків ПФД та КП в область вищих енергій. Показано, що магнітне поле з індукцією 10-15 Тл впливає на оптичні характеристики наносистеми так само, як і зменшення товщини зовнішньої оболонки.

Висновки до розділу 2

Досліджено вплив електричного і магнітного полів та положення домішки на

енергетичний спектр електрона, енергії зв'язку, ПФД в однамній КТ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ та двоямній КТ $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Показано, що метод розкладу ХФ дозволяє з високою точністю дослідити вплив розміру БСКТ, положення домішки та зовнішніх полів на оптоелектричні властивості електрона в БСКТ.

При дослідженні впливу електричного поля на оптичні властивості КТ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ було встановлено, що електричне поле значно сильніше впливає на основні, ніж на збуджені. Крім того, спостерігається антикросинг енергетичних рівнів (наприклад, $2s$ з $1f$ і $1d$), що є наслідком зняття виродження енергетичного спектра за магнітним квантовим числом.

Виявлено, що енергія зв'язку електрона з нецентральною домішкою залежить як від зовнішніх полів, так і від розміру КТ. Зі збільшенням напруженості електричного поля енергія зв'язку зменшується, якщо напрямок зміщення домішки збігається з напрямком поля, і зростає, якщо напрямок поля протилежний. Максимальне значення енергії зв'язку спостерігається, коли домішка розташована в центрі потенціальної ями. При збільшенні розмірів потенціальної ями енергія зв'язку зміщується в область нижчих значень.

ПФД як функція енергії фотона має кілька піків, що виникають у результаті квантових переходів між різними енергетичними станами. Найвищий пік ПФД спостерігається коли домішка розташована в центрі потенціальної ями $r_{imp} = (r_0 + r_1)/2$. Встановлено, що за відсутності електричного поля основний внесок у ПФД забезпечує квантовий перехід $1s - 1p^0$, який дозволений правилами відбору для систем зі сферичною симетрією. Проте, коли вмикається електричне поле, спрямоване вздовж осі Oz , сферична симетрія системи порушується. Це призводить до зміщення піків ПФД в область нижчих енергій, зокрема піку, який відповідає переходу $1s - 1s^0$. При збільшенні напруженості електричного поля висота цього піку зростає, досягаючи максимального значення. Зі зменшенням ширини потенціальної ями також спостерігається зменшення ПФД. Отже, як електричне

поле, так і ширина потенціальної ями значно впливають на розподіл та інтенсивність піків ПФД, визначаючи оптичні властивості наноструктури.

Дослідження впливу магнітного поля на КТ $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_yGa_{1-y}As$ показало, що для наноструктур із малим радіусом вплив магнітного поля на енергетичний спектр електронів незначний. Проте для структур із більшим радіусом магнітне поле викликає антикросинги енергетичних рівнів. Зі збільшенням магнітного поля енергія електронів зростає, тоді як наявність домішки спричиняє зсув усіх станів з домішкою в область нижчих енергій порівняно з відповідними станами без домішки. Результати енергій та ХФ були отримані за допомогою матричного методу з використанням ортонормованого базису, який отримується для системи без впливу магнітного поля та домішок. Для підтвердження цих результатів також було проведено розрахунок енергетичного спектру електрона методом скінченних елементів, і отримані дані з високою точністю збіглися з результатами, отриманими матричним методом.

Результати вивчення впливу магнітного поля та розташування мілкої донорної домішки на ПФД у БСКТ показали, що за центрального розташування домішки магнітне поле зміщує пік ПФД у низькоенергетичну область. У разі нецентральної домішки залежність ПФД від енергії фотона містить кілька піків, що відповідають внутрішньозонним квантовим переходам. Збільшення розміру ядра наноструктури спричиняє злиття двох найнижчих піків, що призводить до зростання максимального значення ПФД.

Дослідження впливу магнітного поля на оптичні властивості двоямної БСКТ $GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ показало, що ця наносистема демонструє високу чутливість до домішок і зовнішніх полів, особливо в області антикросингу енергетичних рівнів. Зменшення ширини зовнішньої потенціальної ями БСКТ призводить до зсуву піків ПФД та КП в область вищих енергій і посилює вплив квантових переходів у вищі збуджені стани на оптичні характеристики. За відсутності домішки в БСКТ міжпідзонне поглинання відбувається в основному за рахунок переходу $1s^0 - 1p^0$, тоді як за наявності центральної домішки найбільша

інтенсивність поглинання спостерігається для переходу $1s - 2p$ при більшій енергії фотона. Встановлено, що магнітне поле з індукцією 10-15 Тл впливає на оптичні характеристики наносистеми подібно до зменшення товщини зовнішньої оболонки.

РОЗДІЛ 3. ВПЛИВ ЕЛЕКТРИЧНОГО ТА МАГНІТНОГО ПОЛІВ НА ЛІНІЙНИЙ ТА НЕЛІНІЙНИЙ КОЕФІЦІЄНТИ ПОГЛИНАННЯ СВІТЛА БАГАТОШАРОВИМИ СФЕРИЧНИМИ КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ

КП у КТ є одним із ключових параметрів, який визначає їхню здатність ефективно поглинати світло. Для КТ цей коефіцієнт залежить від багатьох чинників, зокрема від розміру КТ, матеріалу її шарів та структури електронних станів, які в свою чергу можна регулювати впливом зовнішніх полів та легуванням КТ домішкою.

Лінійний КП описує процес поглинання світла за стандартних умов, коли інтенсивність світла не призводить до нелінійних ефектів. У цьому випадку величина КП визначається розміром КТ та товщиною її шарів, що впливає на ширину забороненої зони і, відповідно, на довжини хвиль світла, які можуть бути поглинуті. Однак, коли інтенсивність світла стає достатньо високою, з'являються нелінійні процеси, які описує нелінійний КП. Цей показник відображає поведінку КТ за умов високої інтенсивності світла, при якій виникають такі явища, як багатофотонне та насичене поглинання.

Вплив зовнішніх полів відіграє важливу роль у зміні електронних переходів між основним і збудженим станами КТ, що, у свою чергу, може змінювати як лінійний, так і нелінійний КП. Наприклад, прикладення електричного поля призводить до квантово-розмірного ефекту Штарка, який зумовлює зміщення піків КП у сторону вищих або нижчих енергій залежно від сили та напрямку поля. Водночас, під дією магнітного поля спостерігається ефект Зеємана, що призводить до розщеплення енергетичних рівнів та змін висоти піків поглинання.

У цьому розділі, використовуючи матричний метод в рамках наближення ефективної маси та моделі прямокутних потенціальних бар'єрів, було досліджено залежність енергетичного спектру, ХФ електрона, енергії зв'язку, лінійного та нелінійного КП від зовнішніх полів. Також проведено розрахунки, що показують комбінований вплив положення домішки, сили зовнішніх полів та розміру ядра на

оптичні властивості багатошарових сферичних квантових антиточок (БСКАТ).

Результати цього розділу представлені в роботах [202-207].

3.1. Вплив магнітного поля на коефіцієнт поглинання у багатошаровій сферичній квантовій точці

3.1.1. Розв'язок рівняння Шредінгера для електрона у багатошаровій сферичній квантовій точці у магнітному полі

Досліджено БСКТ $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, що складається з ядра $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ радіусом r_0 , внутрішньої оболонки $GaAs$ шириною $\Delta = r_1 - r_0$ та зовнішньої оболонки $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$. Геометрична та потенціальна схема наносистеми наведені на рисунку 3.1.

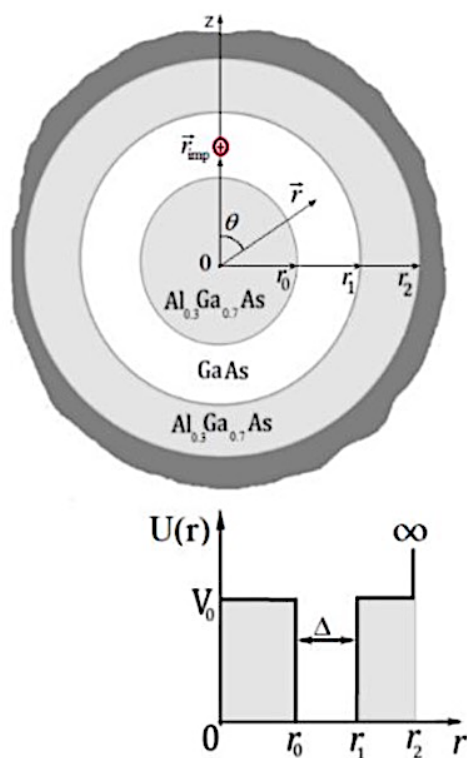


Рисунок 3.1. Геометрична та потенціальна схема наносистеми.

Щоб дослідити вплив магнітного поля на енергетичний спектр і ХФ

електронів в наносистемі з домішкою треба розв'язати рівняння Шредінгера

$$H\Psi_{jm}(\vec{r}) = E_{jm}\Psi_{jm}(\vec{r}) \quad (3.1)$$

з гамільтоніаном

$$H = -\vec{\nabla} \frac{1}{\mu^*(r)} \vec{\nabla} + \frac{\eta}{\hbar\mu^*(r)} L_z + \frac{\eta^2 r^2 \sin^2 \theta}{4\mu^*(r)} - \frac{Ze^2}{\varepsilon|\vec{r} - \vec{r}_{imp}|} + U(r), \quad (3.2)$$

де потенціальна енергія розмірного квантування та ефективна маса мають вигляд

$$U(r) = \begin{cases} V_0, & 0 < r \leq r_0, \quad r_1 < r \leq r_2 \\ 0, & r_0 < r \leq r_1 \\ \infty, & r > r_2 \end{cases}, \quad (3.3)$$

$$\mu(r) = \begin{cases} m_0, & 0 < r \leq r_0, \quad r_1 < r \leq r_2 \\ m_1, & r_0 < r \leq r_1 \end{cases}, \quad (3.4)$$

а параметр η визначається як $\eta = \frac{e\hbar B}{2m_e c R_y}$, $R_y = \frac{\hbar^2}{2m_e a_B^2}$ - стала Рідберга.

Щоб розв'язати рівняння (3.1), ХФ розкладаються у ряд по повному набору точних ХФ, які були отримані для системи без впливу магнітного поля та домішок

$$\Psi_{jm}(\vec{r}) = \sum_n \sum_l c_{nl}^{jm} \Phi_{nlm}(\vec{r}) \quad (3.5)$$

$$\Phi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (3.6)$$

де $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ – сферичні функції, $R_{nl}(r)$ – радіальна частина, яка визначається функціями Бесселя

$$R_{nl}(r) = \begin{cases} A_{nl}^{(0)} i_l(k_{nl}^{(0)} r), & E_{nl} < V_1 \\ A_{nl}^{(0)} j_l(k_{nl}^{(0)} r), & E_{nl} \geq V_1 \\ A_{nl}^{(1)} j_l(k_{nl}^{(1)} r) + B_{nl}^{(1)} n_l(k_{nl}^{(1)} r) & \\ A_{nl}^{(2)} i_l(k_{nl}^{(2)} r) + B_{nl}^{(2)} \kappa_l(k_{nl}^{(2)} r), & E_{nl} < V_2 \\ A_{nl}^{(2)} j_l(k_{nl}^{(2)} r) + B_{nl}^{(2)} n_l(k_{nl}^{(2)} r), & E_{nl} \geq V_2 \end{cases} \quad (3.7)$$

Невідомі коефіцієнти $A_{nl}^{(i)}$, $B_{nl}^{(i)}$ та енергії електронів E_{nl} знаходяться за допомогою граничних умов Бена Данієля-Дьюка на всіх поверхнях розділу

$$\left. \begin{aligned} R_{nl}^{(i)}(r_i) &= R_{nl}^{(i+1)}(r_i). \\ \frac{1}{m_i} \frac{dR_{nl}^{e,h(i)}(r)}{dr} \Big|_{r=r_i} &= \frac{1}{m_{i+1}} \frac{dR_{nl}^{e,h(i+1)}(r)}{dr} \Big|_{r=r_i} \end{aligned} \right\}, i = 0, 1. \quad (3.8)$$

Для визначення коефіцієнтів c_{nl}^{jm} і енергетичного спектру E_{jm} необхідно розв'язати секулярне рівняння

$$|H_{nl,n'l'} - E_{jm} \delta_{n,n'} \delta_{l,l'}| = 0, \quad (3.9)$$

де елементи матриці $H_{n'l',nl}$ визначаються виразом

$$H_{n'l',nl} = E_{nl}^0 \delta_{n',n} \delta_{l',l} + |e| F (\alpha_{l,m} \delta_{l',l+1} + \beta_{l,m} \delta_{l',l-1}) U_{n'l',nl} + F_{n'l',nl} \quad (3.10)$$

тут

$$\alpha_{l,m} = \sqrt{\frac{l^2 - (m+1)^2}{(2l+3)(2l+1)}},$$

$$\beta_{l,m} = \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1}},$$

$$U_{n'l',nl} = \int_0^{r_2} r^3 R_{n'l'}^*(r) R_{nl}(r) dr,$$

$$F_{n'l',nl} = \iiint \Phi_{nlm}^*(\vec{r}) \frac{2Z}{|\vec{r} - \vec{r}_{imp}|} \Phi_{nlm}(\vec{r}) dV.$$

Використовуючи отримані енергії та ХФ електрона, можна розрахувати енергію зв'язку електрона з домішкою

$$E_b^{1s-f} = E_f^{Z=0} - E_{1s}^{Z=1}. \quad (3.11)$$

Для сферичної наносистеми лінійний $\alpha^{(1)}(\omega)$, нелінійний третього порядку

$\alpha^{(3)}(I, \omega)$ та повний коефіцієнти поглинання $\alpha(I, \omega)$ визначаються такими виразами відповідно

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon_R}} \frac{\sigma_v \hbar \omega \Gamma_{fi} |M_{fi}|^2}{(E_{fi} - \hbar \omega)^2 + (\hbar \Gamma_{fi})^2} \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} \alpha^{(3)}(I, \omega) = & -\omega \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon_r}} \left(\frac{I}{2 n_r \varepsilon_0 c} \right) \frac{\sigma_v \hbar \Gamma_{fi} |M_{fi}|^2}{[(E_{fi} - \hbar \omega)^2 + (\hbar \Gamma_{fi})^2]^2} \times \\ & \times \left\{ 4 |M_{fi}|^2 - \frac{(M_{ff} - M_{ii})^2 [3E_{fi}^2 - 4E_{fi}^2 \hbar \omega + \hbar^2 (\omega^2 - \Gamma_{fi}^2)]}{E_{fi}^2 + (\hbar \Gamma_{fi})^2} \right\} \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$\alpha(I, \omega) = \alpha^{(1)}(I, \omega) + \alpha^{(3)}(I, \omega), \quad (3.14)$$

де I – інтенсивність світла, $\hbar \omega$ – енергія падаючого фотона, μ – магнітна проникність системи, $\varepsilon_r = \varepsilon_0 n_r^2$ – дійсна частина діелектричної проникності, n_r^2 – статична складова показника заломлення напівпровідника, c і ε_0 – швидкість світла та діелектрична проникність у вакуумі, σ_s – густина електронів, $E_{fi} = E_f - E_i$ – різниця енергій між кінцевим і початковим рівнями енергії, недіагональний матричний елемент Γ_{fi} називається швидкістю релаксації між початковим та кінцевим станом і є обернено пропорційним до часу релаксації T_{fi} , M_{fi} – дипольний момент квантового переходу, який визначається як

$$M_{fi} = \langle \psi_i | e r \cos \theta | \psi_f \rangle. \quad (3.15)$$

3.1.2. Чисельний аналіз впливу магнітного поля та розміру квантової точки на енергетичний спектр та коефіцієнт поглинання

Розрахунки виконано для наноструктури $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ з такими фізичними параметрами: $m_0 = (0,083x + 0,067)m_e$, $m_1 = 0,067m_e$, $V_0 = 0,6(370x^2 + 1155x) = 227,9$ меВ, середня діелектрична проникність $\varepsilon = 11,5$.

Для порівняння було розглянуто дві наноструктури з різними геометричними параметрами:

1) $r_0 = 5\text{нм}$, $r_1 = 15\text{нм}$ ($\Delta = 10\text{нм}$), $r_2 = 20\text{нм}$;

2) $r_0 = 15\text{нм}$, $r_1 = 25\text{нм}$ ($\Delta = 10\text{нм}$), $r_2 = 30\text{нм}$.

У сферичній наноструктурі без домішок і зовнішніх полів енергетичний спектр і ХФ електрона E_{nl}^0 характеризуються радіальним (n) і орбітальним (l) квантовими числами. Потенціальна яма з глибиною $V_0 = 227,9\text{ меВ}$ і шириною $\Delta = 10\text{нм}$ містить 11 енергетичних рівнів (до $l = 6$) при радіусі ядра $r_0 = 5\text{нм}$ та 21 рівнів (до $l = 11$) при $r_0 = 15\text{нм}$. Однак, цієї кількості членів у розкладі (3.6) недостатньо для забезпечення високої точності розрахунку енергій електронів і ХФ за наявності нецентральної домішки [164, 171]. Тому, для підвищення точності, електронні дискретні стани з енергією вище V_0 також включаються до ортонормованого базису. Це виправдано, оскільки потенціальний бар'єр при $r = r_2$ є нескінченним, що дозволяє забезпечити необхідну точність.

На рисунку 3.2 показані залежності енергій електронів (при $m = 0$) від індукції магнітного поля B у наноструктурі без домішки (штрихові лінії) та з донорною домішкою, розташованою в центрі потенціальної ями $r_{imp} = (r_0 + r_1)/2$ (суцільні лінії). Ці енергії більше не визначаються конкретним значенням орбітального квантового числа, оскільки електронні стани є комбінацією станів з різними значеннями l . Для зручності, на рисунку 3.2 ці стани позначені як $1s$, $1p$, $1d$, $1f$ якщо КТ містить домішку і $1s^0$, $1p^0$, $1d^0$, $1f^0$ якщо домішки в КТ немає.

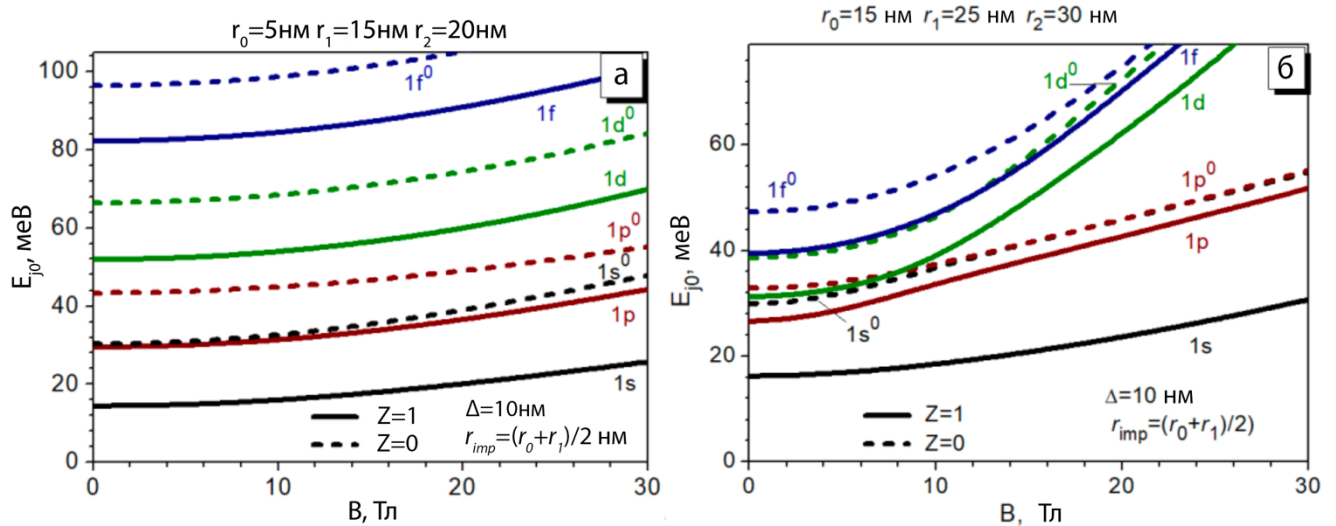


Рисунок 3.2 Залежність енергетичних спектрів електронів від індукції магнітного поля в БСКТ $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ з $r_0 = 5\text{ нм}$, $r_1 = 15\text{ нм}$ і $r_2 = 20\text{ нм}$ (а) та $r_0 = 15\text{ нм}$, $r_1 = 25\text{ нм}$ і $r_2 = 30\text{ нм}$ (б). Суцільні лінії позначають стани при $Z = 1$, а штрихові лінії відповідають станам при $Z = 0$.

З рисунка 3.2 можна зробити висновок, що вплив магнітного поля на енергетичний спектр електронів залежить від розмірів наноструктури. Для наноструктури з малим розміром ядра ($r_0 = 5\text{ нм}$) вплив поля є незначним, що свідчить про стабільність енергетичного спектру електрона за змін умов. Натомість для наноструктури з більшим ядром ($r_0 = 15\text{ нм}$) зі збільшенням індукції магнітного поля спостерігається різке зростання значень енергій, що супроводжується антиперетинами енергетичних рівнів. Зокрема, антиперетини рівнів $1p$ і $1d$ відбуваються при значенні магнітного поля $B = 8\text{ Тл}$, а рівнів $1d$ і $1f$ – при $B = 20\text{ Тл}$. Також, під впливом магнітного поля енергетичні рівні $1s^0$ та $1p^0$ починають зближуватися, що призводить до подібного розподілу густини електронів у цих станах. Аналогічне зближення спостерігається для рівнів $1d^0$ і $1f^0$. Така поведінка енергетичних рівнів під дією магнітного поля вже була детально описана для КТ $CdSe/ZnS$ [97].

На рисунку 3.3 наведено залежності енергій переходів від індукції магнітного поля в БСКТ для різних радіусів ядра в умовах наявності домішки розташованої в

центрі потенціальної ями (суцільні лінії), та у випадку без домішки (штрихові лінії). З рисунка видно, що присутність нецентральної донорної домішки суттєво впливає на характер енергетичних переходів: зокрема, енергія переходу $1p - 1s$ збільшується, тоді як енергія переходу $1d - 1p$ зменшується. Також можна помітити, що енергетичний спектр при малих значеннях індукції магнітного поля зміщується в область нижчих енергій зі збільшенням радіуса КТ.

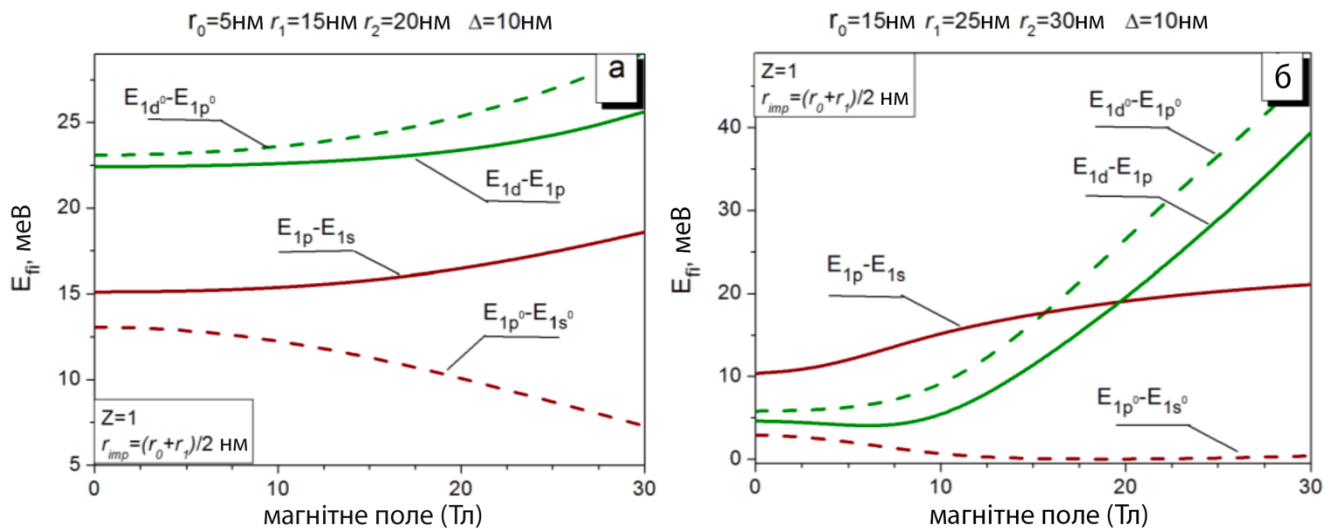


Рисунок 3.3. Залежність енергії переходу від індукції магнітного поля в БСКТ з $r_0 = 5$ нм, $r_1 = 15$ нм і $r_2 = 20$ нм (а) та $r_0 = 15$ нм, $r_1 = 25$ нм і $r_2 = 30$ нм (б).

На рисунку 3.4 показані залежності лінійного, третього порядку нелінійного та повного КП в БСКТ для різних радіусів ядра: $r_0 = 5$ нм (рисунок 3.4а) та $r_0 = 15$ нм (рисунок 3.4б) у відсутності домішки ($Z = 0$) як функція енергії падаючого фотона. З рисунків видно, що два основні піки виникають через квантові переходи $1s - 1p$ і $1p - 1d$ відповідно. При збільшенні індукції магнітного поля енергетична відстань між цими піками збільшується, що вказує на залежність квантових переходів від зовнішнього магнітного поля. На рисунку 3.4а ($r_0 = 5$ нм) видно, що нелінійний КП третього порядку значно менший за лінійний КП. Це свідчить про те, що для наноструктур з меншими розмірами нелінійні ефекти мають менший вплив на загальне поглинання. Однак, на рисунку 3.4б, що відповідає наноструктурі з більшим радіусом ядра ($r_0 = 15$ нм), можна

спостерігати, що величина нелінійного КП зростає зі збільшенням як радіуса ядра, так і індукції магнітного поля. У певних діапазонах енергії фотонів це призводить до того, що загальний КП стає від'ємним. В цьому випадку внесок переходу $1s - 1p$ є значно більшим за $1p - 1d$, що позначається на загальному характері поглинання.

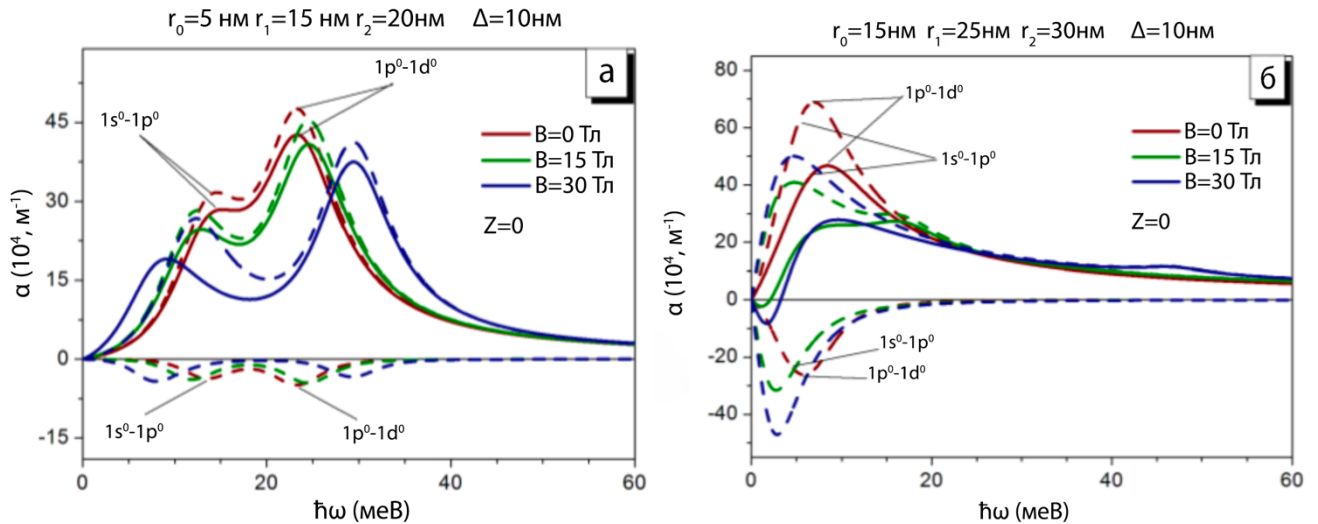


Рисунок 3.4. Залежність КП від індукції магнітного поля в БСКТ з $r_0 = 5$ нм (а) та $r_0 = 15$ нм (б) при $Z = 0$.

На рисунку 3.5 показано залежності КП від індукції магнітного поля в БСКТ для випадків із нецентральною домішкою, розташованою у центрі потенціальної ями ($r_{imp} = (r_0 + r_1)/2$). Дослідження представлені для двох радіусів ядра: $r_0 = 5$ нм (рисунок 3.5а) і $r_0 = 15$ нм (рисунок 3.5б). З рисунків видно, що вплив магнітного поля і домішки змінює висоту та положення піків КП. У випадку наявності нецентральної домішки КП значно зменшується, і цей ефект стає більш вираженим при збільшенні індукції магнітного поля та розміру КТ. Крім того, важливо відзначити, що два піки КП, які відповідають квантовим переходам $1s - 1p$ та $1p - 1d$, починають зближуватися і, зрештою, при певних значеннях магнітного поля та енергій фотонів, зливаються в один. Це явище свідчить про зміну структури енергетичних рівнів у БСКТ під впливом магнітного поля та домішки, що може впливати на загальні характеристики поглинання.

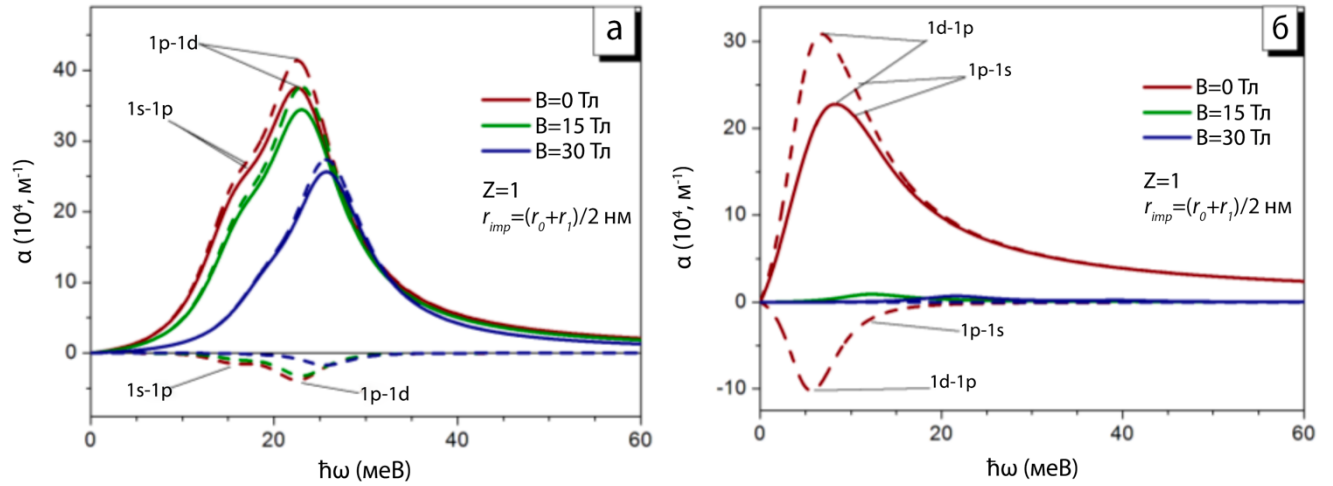


Рисунок 3.5. Залежність КП від індукції магнітного поля в БКТ з $r_0 = 5$ нм (а) та $r_0 = 15$ нм (б) при $Z = 1$ і $r_{imp} = (r_0 + r_1)/2$.

Отримані результати показали, що магнітне поле значно впливає на енергетичний спектр та інтенсивність квантових переходів у наноструктурі, залежно від розміру ядра. Для більшої антиточки ($r_0 = 15$ нм) магнітне поле спричиняє помітне підвищення енергії електронів, а також призводить до антиперетинів рівнів, які не спостерігаються в менших структурах. КП, як лінійний, так і нелінійний, виявляються залежними як від магнітного поля, так і від розміру наноструктури. У менших антиточках домінує лінійний КП, тоді як у більших структурах при сильному магнітному полі нелінійний КП суттєво зростає, і піки, пов'язані з переходами $1s - 1p$ та $1p - 1d$, зливаються. Це свідчить про зміну енергетичної структури під дією поля та домішки.

3.2. Вплив однонаправлених електричного та магнітного полів на коефіцієнт поглинання у багат шаровій сферичній квантовій точці

Розглянуто БСКТ $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ (рисунок 3.6), що складається з ядра $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, внутрішньої оболонки $GaAs$ і зовнішньої оболонки $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ під впливом однонаправлених електричного та магнітного полів.

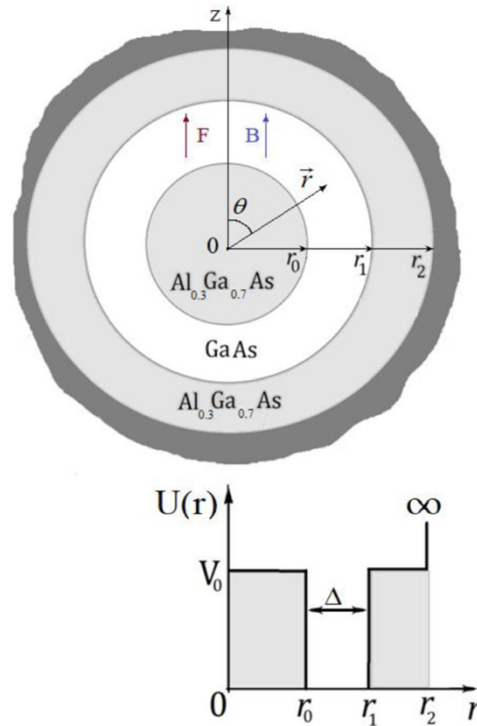


Рисунок 3.6. Геометрична та потенціальна схема КТ.

Для дослідження впливу співнаправлених зовнішніх полів на енергетичний спектр і ХФ електронів розв'язується рівняння Шредінгера

$$H\Psi_{jm}(\vec{r}) = E_{jm}\Psi_{jm}(\vec{r}) \quad (3.16)$$

з гамільтоніаном

$$H = \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) \frac{1}{2m(\vec{r})} \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) + V_F(r, \theta) + U(r) \quad (3.17)$$

де $\vec{A}$ – векторний потенціал, $V_F(r, \theta) = -e|F|r\cos\theta$ – потенціал електричного поля,

$$U(r) = \begin{cases} V_0, & 0 < r \leq r_0, \quad r_1 < r \leq r_2 \\ 0, & r_0 < r \leq r_1 \\ \infty, & r > r_2 \end{cases}, \quad (3.18)$$

та

$$m(r) = \begin{cases} m_0, & 0 < r \leq r_0, \quad r_1 < r \leq r_2 \\ m_1, & r_0 < r \leq r_1 \end{cases}, \quad (3.19)$$

потенціальна енергія розмірного квантування та ефективні маси електрона відповідно.

Теорія для знаходження власних значень та власних функцій а також формули для коефіцієнтів поглинання наведені у підпункті 3.1.

Імовірність міжпідзонних квантових переходів визначається силою осцилятора

$$F_{i-f} = \frac{2m_e(E_i - E_f)|M_{if}|^2}{\hbar^2} \quad (3.20)$$

де $M_{fi} = \langle \psi_i | er \cos \theta | \psi_f \rangle$ – дипольний момент квантового переходу (електромагнітна хвиля поляризована в напрямку вісі Oz).

У розрахунках було використано наступні фізичні параметри наноструктури: ефективна маса носіїв задана як $m_0 = (0,067 + 0,083x)m_e$ і $m_1 = 0,067m_e$, висота потенціального бар'єра визначається виразом $V_0 = 0.6(1155x + 370x^2) = 227,9\text{меВ}$, а середня діелектрична проникність системи становить $\varepsilon = 11,5$. Для того щоб оцінити вплив геометричних розмірів, ми провели порівняння двох наноструктур із різними параметрами:

1) $r_0 = 5\text{нм}$, $r_1 = 15\text{нм}$ ($\Delta = 10\text{нм}$), $r_2 = 20\text{нм}$;

2) $r_0 = 15\text{нм}$, $r_1 = 25\text{нм}$ ($\Delta = 10\text{нм}$), $r_2 = 30\text{нм}$.

На рисунку 3.7 показано залежності енергій електронних станів із квантовим числом $m = 0$ від прикладеного електричного поля при індукціях магнітного поля $B = 0\text{Тл}$, $B = 15\text{Тл}$ та $B = 30\text{Тл}$ у квантових антиточках (КАТ) із різними

розмірами ядра: $r_0 = 5$ нм, $r_1 = 15$ нм та $r_2 = 20$ нм (рисунки 3.7а–в) та $r_0 = 15$ нм, $r_1 = 25$ нм і $r_2 = 30$ нм (рисунки 3.7г–е). Для зручності енергетичні рівні на рисунку позначені як $1s$, $1p$, $1d$, ... відповідно до орбітального квантового числа, яке переважає в розкладі ХФ. З рисунків видно, що енергія основного стану зміщується в область нижчих значень при збільшенні напруженості електричного поля. У випадку КАТ із більшим ядром цей зсув є значнішим. Щодо збуджених станів енергії, то на початку вони мало залежать від електричного поля, проте після досягнення певного значення напруженості електричного поля енергія електронів починає різко зменшуватися. Магнітне поле, у свою чергу, зміщує всі енергетичні рівні у вищу енергетичну область. Цей ефект є більш вираженим у КАТ із більшим ядром, що свідчить про те, що великі наноструктури більше реагують на магнітне поле.

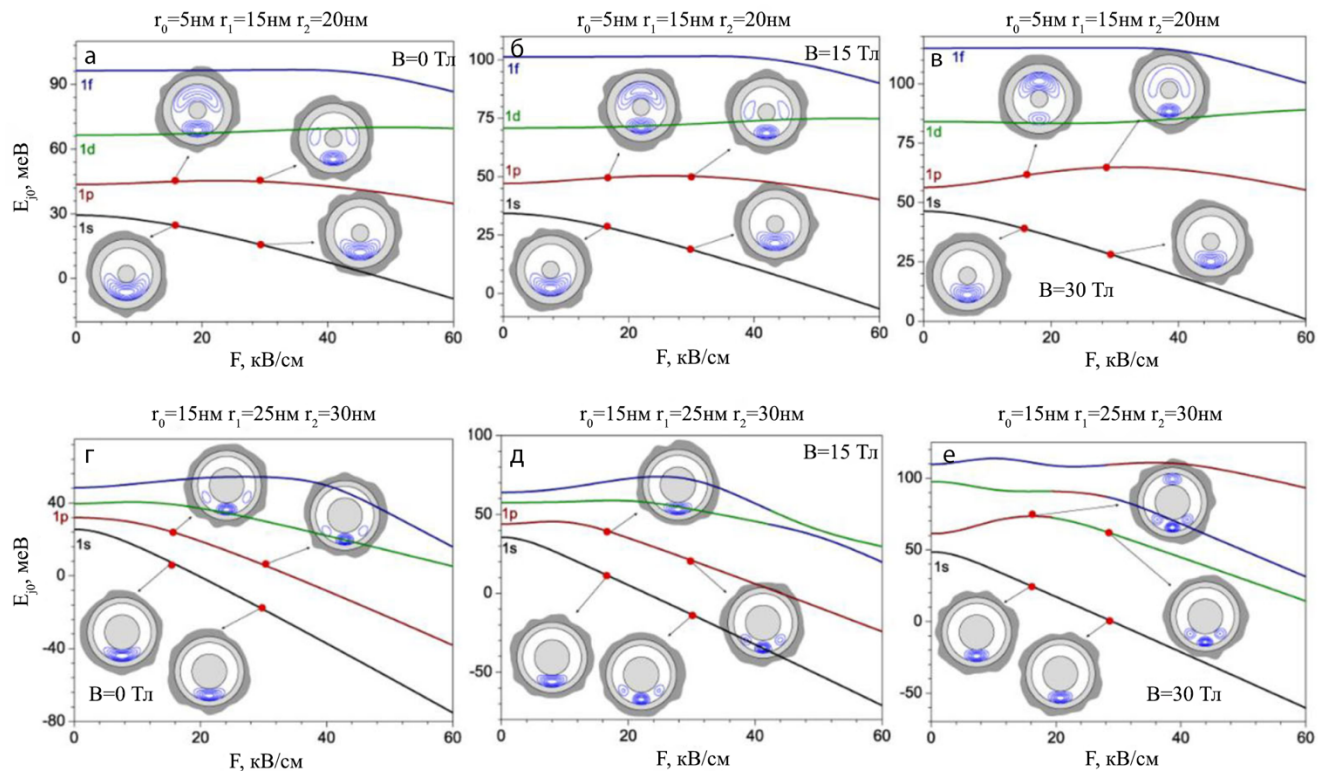


Рисунок 3.7. Залежність енергетичних спектрів електронів від прикладеного електричного поля при $B = 0$ Тл, $B = 15$ Тл, $B = 30$ Тл у КАТ з $r_0 = 5$ нм, $r_1 = 15$ нм та $r_2 = 20$ нм (а-в) і $r_0 = 15$ нм, $r_1 = 25$ нм і $r_2 = 30$ нм (г-е).

Однією з важливих особливостей, що спостерігається на рисунку 3.7, є антикросинг енергетичних рівнів — явище, яке виникає внаслідок різної реакції енергетичних рівнів на електричне і магнітне поля. Це призводить до зміни порядку енергетичних рівнів ($1s$, $1p$, $1d$, $1f$), що особливо помітно при збільшенні розміру КАТ та посиленні магнітного поля. На рисунку електронні стани різної симетрії відображається за допомогою кольорових позначень: чорний для s -станів, червоний для p -станів, зелений для d -станів і синій для f -станів. Наприклад, при збільшенні напруженості електричного поля енергетичний рівень електрона з симетрією, близькою до $1p$, переміщується з другої позиції ($j = 2$ при $F < 20$ кВ/см) на четверту ($j = 4$ при $F > 20$ кВ/см), що є результатом антикросингу (рисунок 3.7е). Це підкреслює складність і багатогранність взаємодії електричного та магнітного полів із електронними станами в наносистемах.

Вставки на рисунку 3.7 показують розподіл електронної густини для основного та першого збудженого станів. Електричне поле зміщує густину електронів для основного стану $1s$ у напрямку, протилежному до напрямку напруженості поля. Густина електронів для першого збудженого стану, яка має два максимуми, зміщується разом із основним станом лише після досягнення певної напруженості електричного поля. Це підкреслює різну поведінку основного та збуджених станів під впливом електричного поля. У свою чергу, магнітне поле стискає електронну густину до осі Oz .

Вплив магнітного поля на енергетичний спектр електрона та розподіл заряду в КАТ є значно сильнішим у випадку більших КАТ. Тому подальші розрахунки виконувались лише для КАТ із більшим розміром ядра ($r_0 = 15$ нм, $r_1 = 25$ нм, $r_2 = 30$ нм).

На рисунку 3.8 наведено залежності сил осцилятора для квантових переходів з основного у збуджені стани $1 - 2$, $1 - 3$ та $1 - 4$ (суцільні лінії) та між збудженими станами $2 - 3$ (штрихова лінія) від напруженості електричного поля при значеннях магнітного поля $B = 0$ Тл (рисунок 3.8а), $B = 15$ Тл (рисунок 3.8б) та $B = 30$ Тл (рисунок 3.8в) для КАТ із розмірами $r_0 = 15$ нм, $r_1 = 25$ нм, $r_2 =$

30 нм.

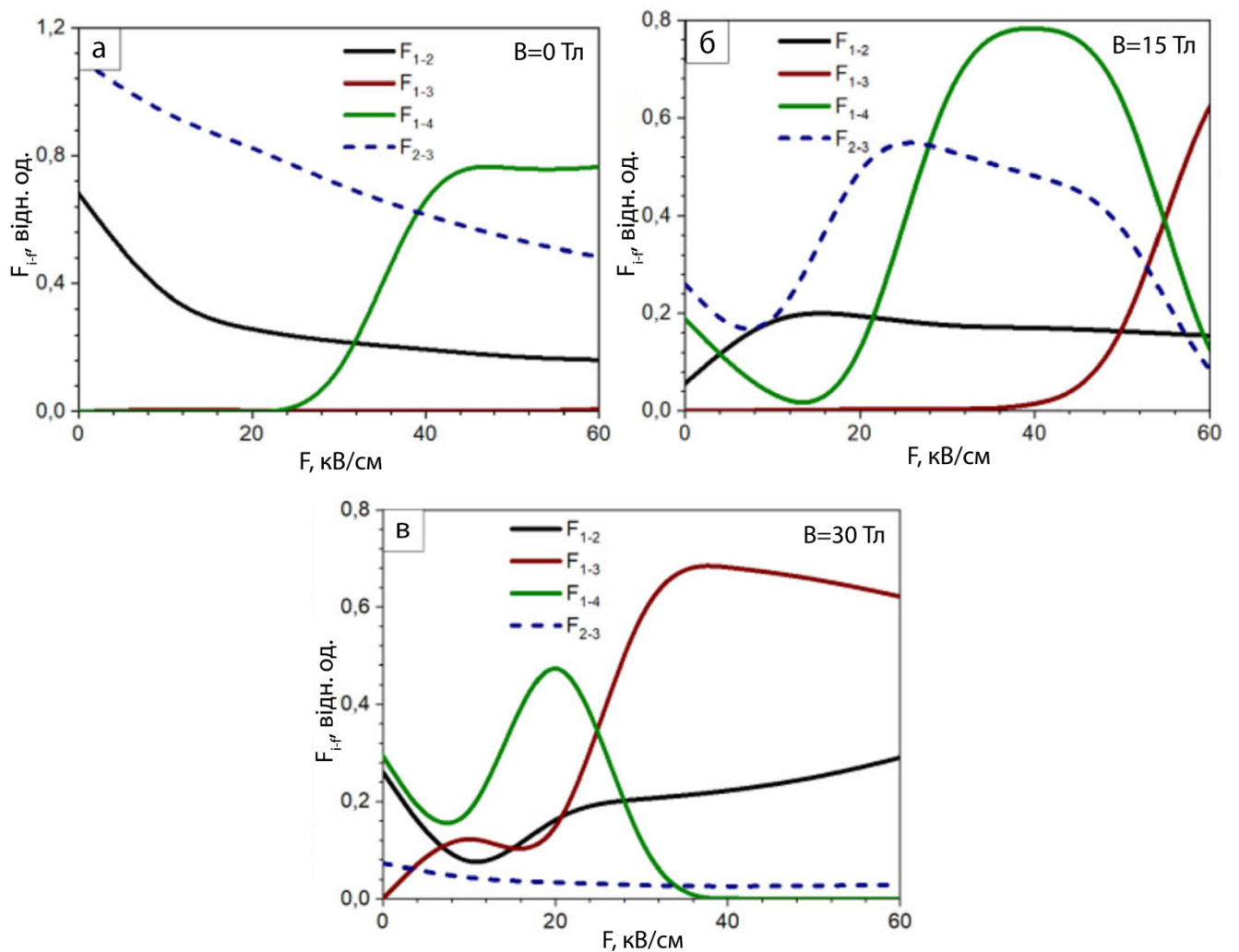


Рисунок 3.8. Залежність сили осцилятора квантових переходів від електричного поля при $B = 0$ Тл (а), $B = 15$ Тл (б), $B = 30$ Тл (в) в КАТ з $r_0 = 15$ нм, $r_1 = 25$ нм, $r_2 = 30$ нм.

За відсутності магнітного поля (рисунок 3.8а) сила осцилятора для дозволених переходів (1 – 2, 2 – 3) швидко зменшується зі збільшенням напруженості електричного поля, що вказує на зниження ймовірності цих переходів при великих значеннях електричного поля. У той же час сила осцилятора для переходу 1 – 4, який заборонений правилами відбору для сферичних систем, починає зростати при напруженості $F > 30$ кВ/см. Така поведінка вказує на порушення сферичної симетрії системи під впливом електричного поля, що робить

можливим здійснення переходів, які заборонені у системах із ідеальною сферичною симетрією. При магнітному полі $B = 15$ Тл (рисунок 3.8б) спостерігається немонотонна залежність сил осцилятора від напруженості електричного поля. Сила осцилятора для дозволеного переходу $1 - 2$ стає меншою, ніж для переходів з основного до більш збуджених станів ($1 - 3$ і $1 - 4$). Це свідчить про те, що магнітне поле порушує сферичну симетрію системи, унаслідок чого нові квантові стани стають комбінацією станів незбудженої системи, а правила відбору для сферичних систем стають недійсними. При ще більшому магнітному полі $B = 30$ Тл (рисунок 3.8в) картина стає ще складнішою. Залежності сил осцилятора демонструють більш виражену зміну поведінки, підкреслюючи вплив поєднання магнітного і електричного полів на симетрію системи та ймовірність переходів.

Рисунок 3.9 демонструє комбінований вплив електричного та магнітного полів на КП, зумовлений різними квантовими переходами. Зображені залежності лінійного (штрихова лінія), нелінійного третього порядку (штрихова лінія) та повного (суцільна лінія) КП для переходів $1 - 2$, $1 - 3$, $2 - 3$ залежно від енергії падаючого фотона. Кольорове позначення відображає різні значення напруженості електричного поля: $F = 0$ кВ/см – червоний, $F = 15$ кВ/см – зелений, $F = 30$ кВ/см – синій. З рисунка видно, що при $F = 0$ кВ/см пік лінійного та нелінійного коефіцієнтів поглинання, спричиненого переходом $1 - 2$, зростає зі збільшенням магнітного поля. При цьому загальний коефіцієнт поглинання при низьких енергіях падаючого світла стає від'ємним через зміщення піку нелінійного поглинання в область низьких енергій. Коли напруженість електричного поля збільшується до $F = 15$ кВ/см і $F = 30$ кВ/см, коефіцієнт поглинання для переходу $1 - 2$ зменшується зі збільшенням магнітного поля. Це означає, що магнітне поле підсилює інтенсивність поглинання лише при низькій напруженості електричного поля. Поглинання для переходу $1 - 3$ при $B = 0$ Тл та $B = 15$ Тл має невеликі значення та зростає лише при $B = 30$ Тл і $F = 30$ кВ/см. Це пояснюється швидким зростанням сили осцилятора F_{1-3} під одночасним впливом сильного

електричного та магнітного полів. Загалом, електричне поле зміщує енергію квантових переходів у область вищих енергій, за винятком переходу 2 – 3 при $B = 30$ Тл, де спостерігається протилежний ефект.

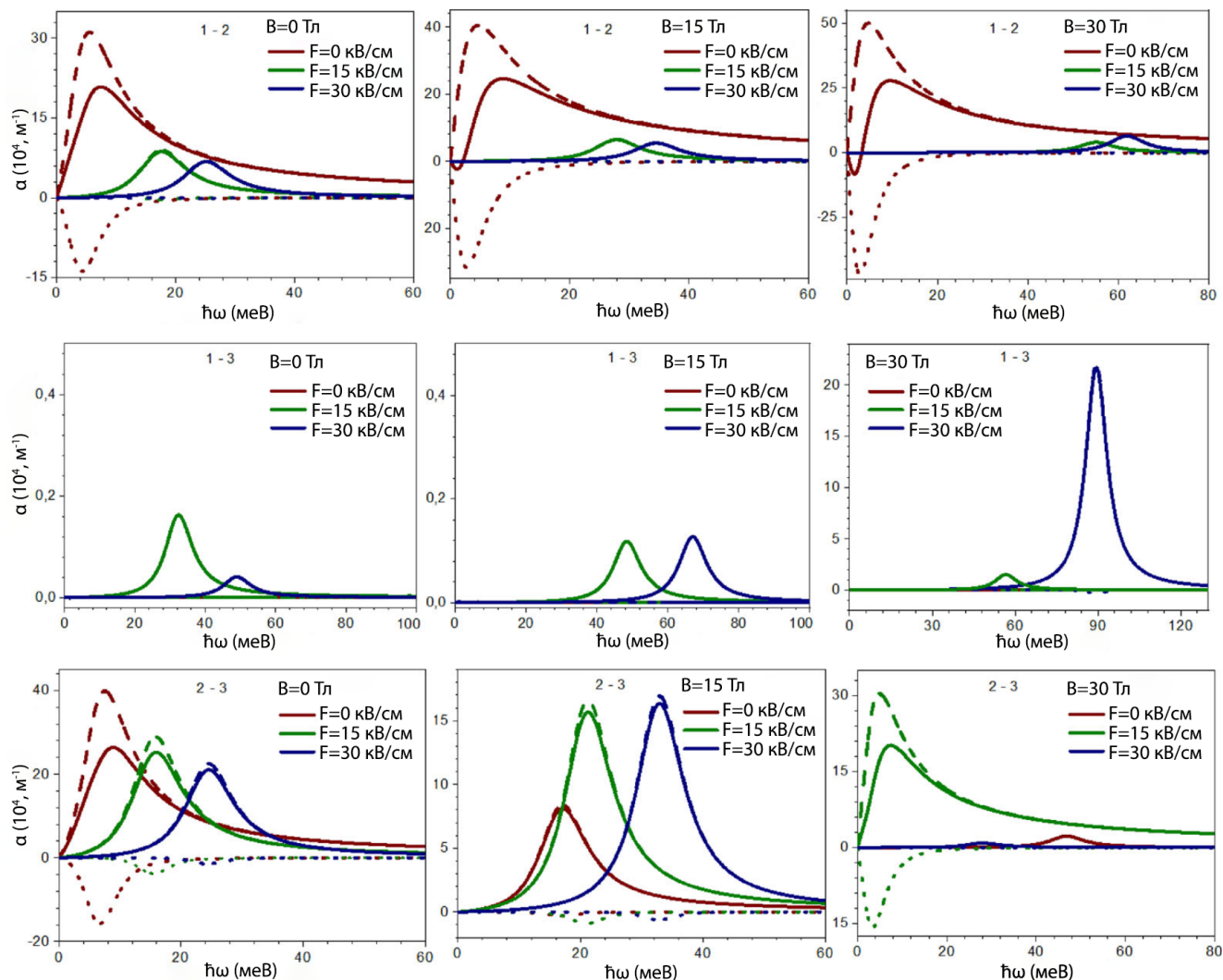


Рисунок 3.9. Лінійний (штрихова лінія), нелінійний третього порядку (пунктир) і повний (суцільна лінія) коефіцієнти оптичного поглинання КАТ від енергії падаючого фотона $\hbar\omega$ з інтенсивністю $I = 0,04$ МВт/см².

Отримані результати демонструють, що електричне поле зміщує енергетичні рівні електронів до нижчих значень, і цей ефект більш виражений у системах із більшим ядром. Вплив магнітного поля, своєю чергою, викликає антикросинг енергетичних рівнів, що призводить до порушення звичайного порядку рівнів. Це явище особливо помітне для КАТ з більшими розмірами. Досліджено також сили

осцилятора для міжрівневих переходів, які значно залежать від поєднання електричного і магнітного полів. Електричне поле зменшує ймовірність дозволених переходів і робить можливими заборонені переходи, що свідчить про порушення сферичної симетрії системи. Магнітне поле додатково впливає на силу осцилятора: сила осцилятора для дозволеного переходу 1 – 2 стає меншою порівняно з переходами з основного до більш збуджених станів. Коефіцієнти оптичного поглинання також демонструють складну поведінку залежно від зовнішніх полів. Зі збільшенням напруженості електричного поля КП зміщується у бік вищих енергій, окрім переходу 2 – 3 при $B = 30$ Тл, а магнітне поле підсилює поглинання для низькоенергетичних переходів лише за низької напруженості електричного поля. Ці результати узгоджуються з даними попередніх досліджень, які вивчали окремий вплив електричних та магнітних полів на міжпідзонні квантові переходи у сферичних КТ [70, 147, 163-164, 66]. Вони підкреслюють складність взаємодії між зовнішніми полями, показуючи, що комбінований ефект електричного та магнітного полів може суттєво змінювати оптичні властивості наносистем. Це знання є важливим для подальшого розвитку технологій, де потрібно налаштовувати електронні та оптичні властивості КТ, щоб досягти бажаних характеристик для різних оптоелектронних приладів.

3.3. Вплив однонаправлених електричного та магнітного полів на коефіцієнт поглинання у багат шаровій сферичній квантовій точці з донорною домішкою

Досліджено БСКАТ $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, яка складається з ядра $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ (потенціальний бар'єр радіусом r_0), оболонки $GaAs$ (потенціальна яма товщиною $\Delta = r_1 - r_0$) та оболонки $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ (потенціальний бар'єр шириною $r_2 - r_1$). Домішка мілкового донора розміщується в положенні r_{imp} на осі Oz , яке збігається з напрямками зовнішнього прикладеного електричного та магнітного полів.

У наближенні ефективної маси гамільтоніан електрона, утримуваного в БСКАТ, під впливом нецентральної донорної домішки та зовнішніх полів, визначається як

$$H = \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \frac{1}{2\mu(\vec{r})} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) + \frac{Ze^2}{\varepsilon |\vec{r} - \vec{r}_{imp}|} + V_F(r, \theta) + U(r) \quad (3.21)$$

Щоб знайти власні значення та власні функції електрона необхідно розв'язати рівняння Шредінгера з використанням (3.22). Детально теорія їх знаходження а також формули для коефіцієнтів поглинання наведені у підпункті 3.1.

ХФ основного стану домішки $\Psi(\vec{r})$ можна використовувати для обчислення поляризованості домішки. Поляризованість визначається шляхом ділення різниці дипольного моменту квантового переходу за наявності прикладеного електричного поля та без нього на напруженість електричного поля F [76]

$$\alpha_p = -\frac{e}{F} \{ \langle \Psi(r) | r \cos \theta | \Psi(r) \rangle_{F \neq 0} - \langle \Psi(r) | r \cos \theta | \Psi(r) \rangle_{F=0} \}. \quad (3.22)$$

Розрахунки виконано для наноструктури з такими фізичними параметрами: $x = 0.3$, $m_0 = 0.092m_e$, $m_1 = 0.067m_e$, де m_e – маса вільного електрона, $V_0 = 227.9 \text{ meV}$, $\varepsilon = 11.5$ – усереднена діелектрична проникність.

Для порівняння досліджувалися наноструктури двох розмірів:

- 1) $r_0 = 5 \text{ нм}$, $r_1 = 15 \text{ нм}$, $r_2 = 20 \text{ нм}$;
- 2) $r_0 = 15 \text{ нм}$, $r_1 = 25 \text{ нм}$, $r_2 = 30 \text{ нм}$.

На рисунку 3.10 наведено залежності енергій електронів в основному стані (1s) та кількох збуджених станів (1p, 1d та 1f при $m = 0$) від напруженості електричного поля F при різних значеннях індукції магнітного поля ($B = 0; 15; 30 \text{ Тл}$) у БСКАТ з радіусом ядра $r_0 = 5 \text{ нм}$ (рисунок 2а-в) та $r_0 = 15 \text{ нм}$ (рисунок 2г-е). Отримані результати показують, що при розташуванні домішки в центрі потенціальної ями $r_{imp} = (r_1 + r_0)/2$ енергії електрона в наноструктурі з

більшим радіусом ядра є нижчими порівняно з наноструктурою з меншим радіусом ядра. Однак із збільшенням магнітного поля енергія електронів зростає в обох випадках. Також спостерігається, що зі збільшенням напруженості електричного поля енергія основного стану зміщується у нижчу енергетичну область, причому для системи з меншим радіусом ядра ($r_0 = 5$ нм) вплив електричного поля на основний стан є більш вираженим, ніж на збуджені стани.

Залежності енергетичних рівнів від електричного та магнітного полів призводять до явища антикросингу, при якому енергетичні рівні наближаються один до одного і можуть змінювати свій порядок. У зоні антикросингу відбувається зміна форми ХФ, що свідчить про зміну симетрії електронних станів [196].

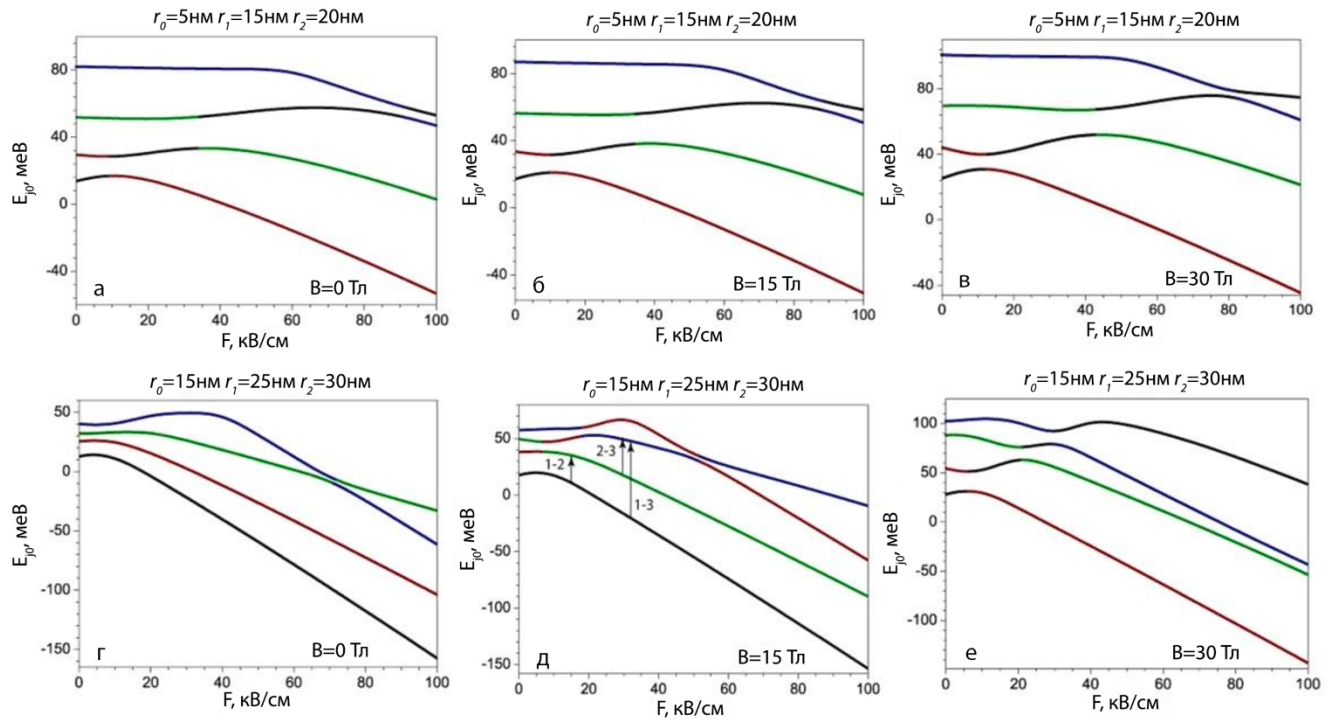


Рисунок 3.10. Залежність енергетичного спектру електрона від прикладеного електричного поля при індукції магнітного поля $B = 0$ Тл, $B = 15$ Тл та $B = 30$ Тл у БСКАТ з $r_0 = 5$ нм, $r_1 = 15$ нм і $r_2 = 20$ нм (а-в) та $r_0 = 15$ нм, $r_1 = 25$ нм і $r_2 = 30$ нм (г-е). Положення домішки – $r_{imp} = (r_1 + r_0)/2$.

Оскільки вплив магнітного поля на енергетичний спектр електронів сильніший для БСКАТ з більшим радіусом ядра, подальші розрахунки виконуються лише для КТ з $r_0 = 15$ нм, $r_1 = 25$ нм, $r_2 = 30$ нм.

Рисунок 3.11 показує залежності енергії зв'язку основного стану електрона з домішкою від напруженості електричного поля при різних значеннях магнітного поля ($B = 0; 15; 30$ Тл). З графіка видно, що енергія зв'язку значно залежить від зовнішніх полів. Помітно, що зі збільшенням магнітного поля енергія зв'язку електрона зростає. Це пояснюється тим, що магнітне поле утримує електрон ближче до осі Oz , створюючи додатковий утримуючий ефект, який підвищує енергію зв'язку між електроном і домішкою. Що стосується електричного поля, його вплив змінюється залежно від напрямку. При позитивних значеннях напруженості електричного поля ($F > 0$) електронна густина зміщується від домішки, що призводить до різкого зменшення енергії зв'язку. Така поведінка пояснюється тим, що електричне поле створює силу, яка витісняє електрон від домішки, зменшуючи їхню взаємодію.

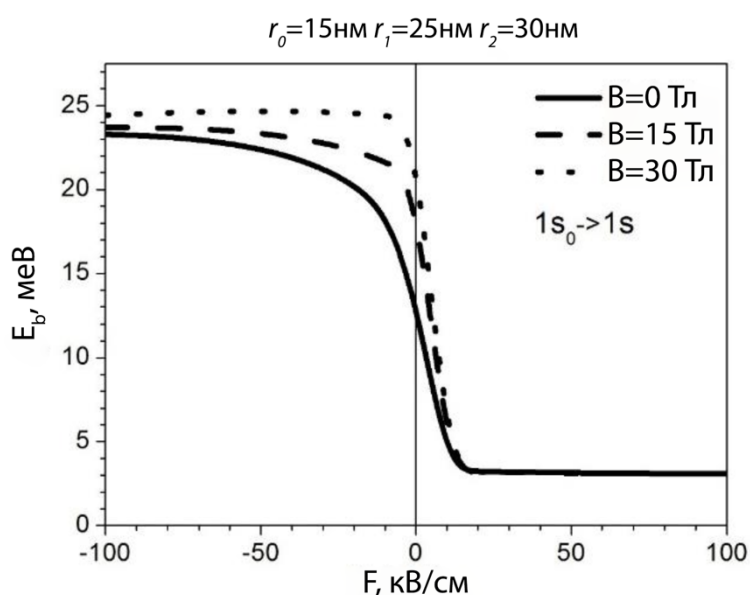


Рисунок 3.11. Енергія зв'язку основного стану електронна і домішки як функція напруженості електричного поля при $B = 0; 15; 30$ Тл.

На рисунку 3.12 зображено лінійний, нелінійний третього порядку та повний КП донорної домішки в БСКАТ для переходів $1 - 2$, $2 - 3$ та $1 - 3$ як функцію енергії падаючого фотона за різних значень електричного та магнітного полів. Суцільні криві представляють повний КП, штрихові криві відображають лінійні та

нелінійні КП. З графіків видно, що лінійний, нелінійний і повний КП сильно залежать від напруженості електричного та магнітного полів. Нелінійний КП значно менший за повний, що свідчить про відносно малий внесок нелінійних ефектів у загальний процес поглинання. Положення піків поглинання відповідають енергіям переходів (1 – 2, 2 – 3, 1 – 3), як показано на рисунку 3.10. Висота піків визначається дипольним моментом квантового переходу, який залежить від симетрії ХФ електрона в початковому та кінцевому станах.

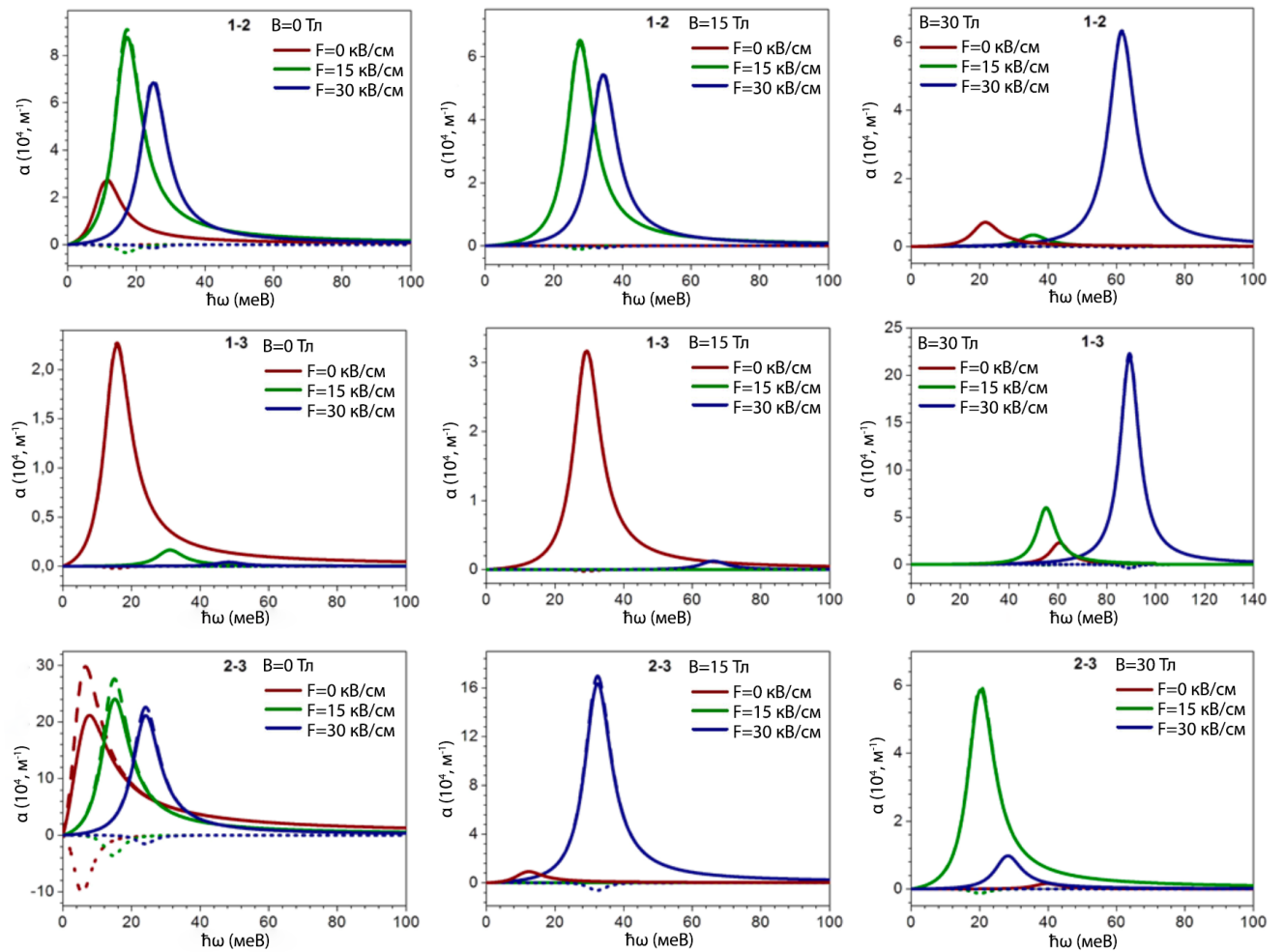


Рисунок 3.12. Залежність КП від енергії фотона $\hbar\omega$ при різних значеннях сили магнітного та електричного полів в БСКАТ з $r_0 = 15$ нм, $r_1 = 25$ нм і $r_2 = 30$ нм.

При збільшенні індукції магнітного поля піки КП для всіх переходів зміщуються в область вищих енергій, що свідчить про зростання енергії переходів під впливом магнітного поля. На рисунку також видно, що вплив електричного та

магнітного полів на висоту піків КП має складний, немонотонний характер. Найбільший пік поглинання спостерігається для переходу 2 – 3 за відсутності магнітного поля. Проте, зі збільшенням інтенсивності магнітного поля висота цього піку зменшується, що свідчить про зниження ймовірності даного переходу. Для переходу 1 – 3, навпаки, висота піку зростає зі збільшенням магнітного поля, що вказує на зміну симетрії ХФ електрона та зміну дипольного моменту квантового переходу.

Порівняння з результатами, розглянутими у пункті 3.2, демонструє, що лінійний та нелінійний КП третього порядку для системи без домішок є вищими, ніж для системи з домішкою. Це пояснюється меншою величиною дипольного моменту квантового переходу у присутності домішки, яка впливає на симетрію ХФ та їх взаємодію з зовнішніми полями.

На рисунку 3.13 показана залежність поляризованості домішки від прикладеного електричного поля при різних значеннях магнітного поля ($B = 0; 15; 30$ Тл) для КТ із різними розмірами ядра: $r_0 = 5$ нм (рисунок 3.13а) і $r_0 = 15$ нм (рисунок 3.13б). З графіків видно, що поляризованість збільшується зі збільшенням розміру КТ та демонструє немонотонну поведінку при зміні електричного поля. З рисунка зрозуміло, що поляризованість значно змінюється під впливом електричного поля, тоді як зміна магнітного поля має незначний вплив. Це свідчить про те, що електричне поле є основним фактором, що впливає на поляризованість домішки. Максимальна поляризованість спостерігається при певному значенні електричного поля, після чого вона починає зменшуватись. Крім того, поляризованість домішки має менше значення, коли електричне поле спрямоване у протилежному напрямку осі Oz . Подібна залежність поляризованості від електричного поля була отримана і в попередніх дослідженнях [145], що підтверджує узгодженість представлених результатів з уже існуючими науковими даними.

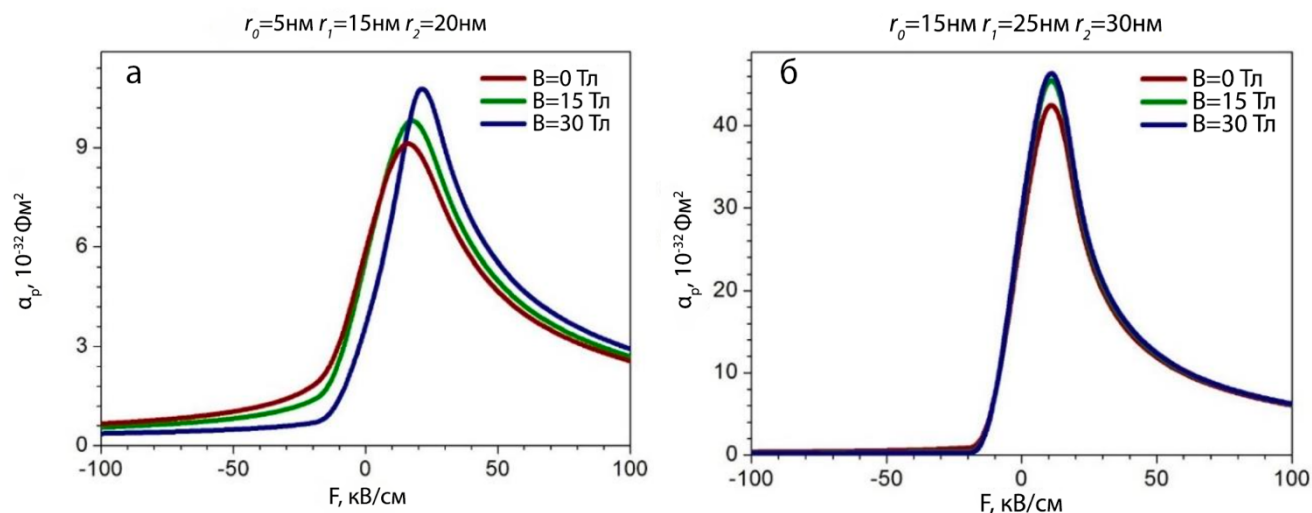


Рисунок 3.13. Залежність поляризованості домішки від прикладеного магнітного та електричного полів у БСКАТ з $r_0 = 5$ нм, $r_1 = 15$ нм і $r_2 = 20$ нм (а) та $r_0 = 15$ нм, $r_1 = 25$ нм і $r_2 = 30$ нм (б).

Отримані результати показали, що зі збільшенням напруженості електричного поля при різних значеннях індукції магнітного поля спостерігаються різні зсуви енергетичних рівнів електронів, що призводить до їх антиперетину. Така поведінка енергетичних рівнів призводить до складних змін у хвильових функціях і впливає на коефіцієнт поглинання. Піки коефіцієнта поглинання зміщуються в область вищих енергій як зі збільшенням напруженості електричного поля, так і індукції магнітного поля. Визначено, що наявність домішки в центрі потенціальної ями зменшує висоту як лінійного, так і третього порядку нелінійного піку поглинання. Залежність поляризованості від електричного поля немонотонна. Коли електричне поле посилюється, поляризованість спочатку швидко зростає, досягає максимуму, а потім спадає, що узгоджується з попередніми дослідженнями. Магнітне поле, в свою чергу, має незначний вплив на поляризованість, збільшуючи на незначну величину висоту максимуму поляризованості.

Висновки до розділу 3

Досліджено електронні та оптичні властивості БСКАТ $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ з домішками та без них під впливом зовнішніх полів. Показано, що енергетичний спектр, коефіцієнт поглинання, сила осцилятора та поляризованість домішки сильно залежать від розміру КТ, напруженості електричного поля та індукції магнітного полів.

Дослідження показали, що енергетичний спектр електронів у наноструктурах значно залежить від розміру ядра та впливу зовнішніх полів. Зокрема, електричне поле, різко зміщує енергії основного стану електронів у нижчу енергетичну область. Цей ефект особливо помітний у структурах із більшим ядром, де зсув основного стану під впливом електричного поля є значнішим. Щодо збуджених станів, у випадку КТ без домішки, на початку їх енергії незначно залежать від електричного поля, але після досягнення певного значення напруженості електричного поля енергія електронів у збуджених станах починає різко знижуватися. Це підкреслює нерівномірний вплив електричного поля на енергетичний спектр залежно від рівня збудження. Магнітне поле, навпаки, зміщує всі енергетичні рівні в область вищих енергій, і цей ефект також є більш вираженим для наноструктур з більшим радіусом ядра. Вплив електричного та магнітного полів на енергетичні рівні призводить до явища антикросингу, при якому енергетичні рівні наближаються один до одного і можуть змінювати свій порядок. У зоні антикросингу відбувається зміна форми хвильових функцій, що свідчить про зміну симетрії електронних станів.

Вивчення впливу електричного та магнітного полів на силу осцилятора в КТ без домішки показало, що зовнішні поля суттєво змінюють поведінку системи, порушуючи її сферичну симетрію. За відсутності магнітного поля сила осцилятора для дозволених переходів ($1s - 1p$, $1p - 1d$) зменшується зі збільшенням електричного поля. Одночасно зростає сила осцилятора для переходу $1s - 1f$, який заборонений для сферичних систем. Це свідчить про те, що електричне поле руйнує

симетрію системи, роблячи можливими переходи, які раніше були заборонені. Магнітне поле ускладнює цю залежність, формуючи немонотонні зміни сили осцилятора. В результаті сила осцилятора переходу $1s - 1p$ зменшується порівняно з переходами з до інших збуджених станів, таких як $1s - 1d$ і $1s - 1f$, що вказує на вплив магнітного поля на симетрію та енергетичну структуру системи. У цьому випадку квантові стани стають комбінацією різних станів, характерних для систем без зовнішніх полів.

У результаті дослідження впливу зовнішніх полів на енергію зв'язку електрона з домішкою і отримано, що енергія зв'язку електрона з домішкою залежить від взаємодії зовнішніх електричних і магнітних полів: магнітне поле підвищує енергію зв'язку, утримуючи електрон ближче до домішки, тоді як електричне поле може як підсилювати, так і послаблювати цей зв'язок залежно від свого напрямку.

Аналіз лінійного та нелінійного КП демонструє залежність від розміру структури, зовнішніх полів та домішок. Отримано, що у менших наноструктурах домінує лінійний КП, оскільки ефект магнітного поля тут менш значний. Натомість, у більших структурах, при посиленні магнітного поля, нелінійний КП суттєво зростає, що свідчить про підвищену чутливість до магнітних впливів та про зростання нелінійних ефектів у системі. У випадку наявності нецентральної домішки КП значно зменшується, і цей ефект стає більш вираженим при збільшенні індукції магнітного поля та розміру КТ. Крім того, два піки КП, які спостерігаються у випадку КТ без домішки, об'єднуються в один. Розглядаючи комбінований вплив електричного і магнітного полів на КП в КТ без домішки, то отримали, що збільшення напруженості електричного поля зміщує енергію квантових переходів у бік вищих енергій, окрім переходу $1p - 1d$ при $B = 30$ Тл. Магнітне поле посилює поглинання для низькоенергетичних переходів лише при слабкому електричному полі, при цьому загальний коефіцієнт поглинання для низьких енергій стає від'ємним, що пояснюється зміщенням піку нелінійного поглинання в область низьких енергій. Для КТ з домішкою дослідження показали, що піки

коефіцієнта поглинання зміщуються до вищих енергій зі зростанням як електричного, так і магнітного полів. Визначено, що наявність домішки в центрі потенціальної ями зменшує висоту як лінійного, так і третього порядку нелінійного піку поглинання.

Розглядаючи вплив зовнішніх полів на поляризованість домішки, отримано, що цей параметр значно змінюється під впливом електричного поля. При збільшенні напруженості електричного поля поляризованість швидко зростає, досягаючи максимуму, а потім знижується. У свою чергу, магнітне поле впливає значно слабше, лише дещо підвищуючи максимальне значення поляризованості.

РОЗДІЛ 4. ВПЛИВ ЗОВНІШНІХ ПОЛІВ НА ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КВАНТОВОЇ ТОЧКИ ЯДРО–ОБОЛОНКА II ТИПУ *CdSe/ZnTe* ТА *ZnTe/CdSe*

КТ II типу це клас КТ, де і зона провідності, і валентна зона мають вищу енергію в одному матеріалі, ніж в іншому. У таких системах один тип носія (електрон або дірка) переважно обмежений ядром, тоді як інший знаходиться в основному в оболонці. Це просторове розділення носіїв заряду призводить до властивостей, які суттєво відрізняються від характеристик КТ I типу. Зокрема, у КТ II типу можливо досягти випромінювання в ближньому інфрачервоному діапазоні навіть за умов використання матеріалів із широкою забороненою зоною, які в КТ I типу зазвичай не забезпечують випромінювання в цьому діапазоні.

Вплив зовнішніх полів, таких як електричні та магнітні, здатний модифікувати оптичні властивості цих КТ. Розуміння взаємодії між зовнішніми полями та квантовими точками дозволяє створювати наносистеми з потрібними оптичними характеристиками для використання у різних оптоелектронних пристроях, таких як сонячні елементи, регульовані джерела світла, фотодетектори та для квантових обчислень.

Зовнішні електричні та магнітні поля порушують сферичну симетрію КТ, що робить класичні правила відбору квантових переходів, характерні для сферичних систем, недійсними. У результаті впливу цих полів нові стани квазічастинок є суперпозицією станів із різними орбітальними квантовими числами. Це вимагає врахування всіх можливих квантових переходів при вивченні оптичних властивостей, оскільки обмеження лише основними станами недостатньо для повного розуміння взаємодії. Саме такі дослідження для КТ II типу виконуються в цьому розділі.

У цьому дослідженні у наближенні ефективної маси розглянуто вплив зовнішніх полів на енергетичний спектр та міжзонні квантові переходи електронів у сферичних КТ II типу *CdSe/ZnTe* і *ZnTe/CdSe*. Матричним методом

розраховано залежності енергетичних спектрів, ХФ електрона і дірки, сили осцилятора і коефіцієнта поглинання світла від зовнішнього прикладеного електричного та магнітного полів для сферичних КТ різного розміру. Основні результати досліджень представлені в роботах [208-210].

4.1. Теоретичне моделювання впливу електричного поля на оптичні властивості сферичних квантових точок II типу

4.1.1. Рівняння Шредінгера для електрона і дірки та метод його розв'язку

Було досліджено вплив електричного поля на оптичні властивості КТ II типу $CdSe/ZnTe$ та $ZnTe/CdSe$, які мають радіус ядра r_0 і оболонки r_1 . На рисунку 4.1 зображено геометричну схему та схему потенціальної енергії електронів і дірок для обох систем. Візуалізація показує як змінюються потенціальні бар'єри для електронів та дірок у відсутності електричного поля (верхня частина) та за наявності прикладеного електричного поля, спрямованого вздовж осі Ox (нижня частина). У випадку без прикладеного електричного поля (верхні частини обох колонок) електрони та дірки мають чітко визначені потенціальні бар'єри в межах різних шарів структури. Для системи $CdSe/ZnTe$ (ліва колонка) електрони, в основному, утримуються в ядрі, тоді як дірки знаходяться в оболонці. У випадку системи $ZnTe/CdSe$ (права колонка), навпаки, дірки переважно обмежені ядром, а електрони — оболонкою. При прикладенні електричного поля потенціальні профілі змінюються, що впливає на енергетичні рівні електронів та дірок. Поле спричиняє зсув потенціальних бар'єрів, що змінює умови утримання носіїв у структурі. Ці зміни можуть призводити до змін у міжзонних переходах, що, у свою чергу, впливає на оптичні властивості КТ.

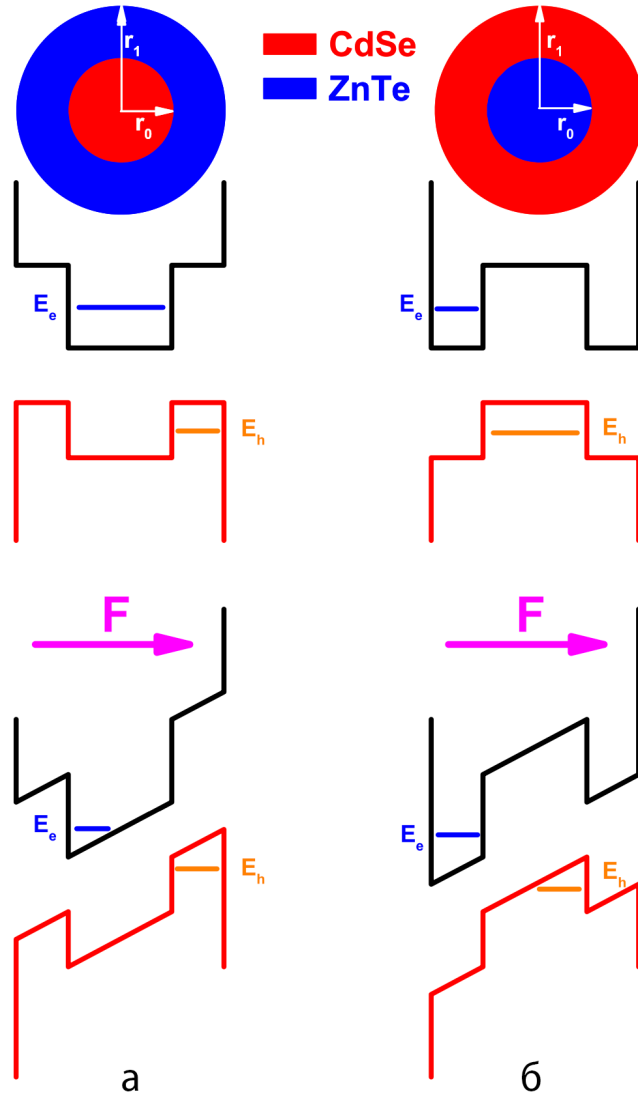


Рисунок 4.1. Потенціальна та геометрична схема КТ *CdSe/ZnTe* (ліва колонка) і *ZnTe/CdSe* (права колонка) без (верхня частина) і з (нижня частина) прикладеним електричним полем.

Рівняння Шредінгера для електрона або дірки, обмежених у наносистемі *CdSe/ZnTe* або *ZnTe/CdSe* під впливом прикладеного електричного поля, спрямованого вздовж осі Ox (де $x = r \cos \theta$) визначається як

$$H_{e(h)} \Psi_{e(h)}^{jm}(\vec{r}) = E_{e(h)}^{jm} \Psi_{e(h)}^{jm}(\vec{r}), \quad (4.1)$$

де гамільтоніан $H_{e(h)}$ має вигляд

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \left(\frac{1}{m_{e(h)}^*(r)} \right) \vec{\nabla} \mp e F r \cos \theta + U_{e(h)}(r), \quad (4.2)$$

тут e — абсолютне значення заряду електрона, F — напруженість електричного поля. Знак «мінус» у другому члені відповідає електрону, а «плюс» — дірці. Параметри $m_{e(h)}^*$ та $U_{e(h)}$ — це ефективна маса носія заряду та потенціальна енергія розмірного квантування. У випадку КТ $CdSe/ZnTe$ потенціал розмірного квантування електронів (дірок) визначається як

$$U_e(r) = \begin{cases} 0, & r \leq r_0 \\ V_e, & r_0 < r \leq r_1, \\ \infty, & r > r_1 \end{cases}$$

$$U_h(r) = \begin{cases} V_h, & r \leq r_0 \\ 0, & r_0 < r \leq r_1, \\ \infty, & r > r_1 \end{cases}$$

тоді як для $ZnTe/CdSe$ потенціал розмірного квантування має вигляд

$$U_e(r) = \begin{cases} V_e, & r \leq r_0 \\ 0, & r_0 < r \leq r_1, \\ \infty, & r > r_1 \end{cases}$$

$$U_h(r) = \begin{cases} 0, & r \leq r_0 \\ V_h, & r_0 < r \leq r_1. \\ \infty, & r > r_1 \end{cases}$$

У розрахунках враховується ефективна маса носія заряду, яка залежить від його положення. Це означає, що використовуються різні значення ефективної маси електрона або дірки, які відповідають матеріалам напівпровідників $CdSe$ і $ZnTe$.

Для дослідження властивостей електрона та дірки в наносистемі під впливом електричного поля було використано метод розкладу ХФ квазічастинок на повний набір власних функцій електрона або дірки ($\Phi_{e(h)}^{nlm}(\vec{r})$) у сферичній наноструктурі без зовнішнього поля, які були отримані як точні розв'язки рівняння Шредінгера.

При введенні зовнішнього електричного поля сферична симетрія задачі порушується, і нові стани, що характеризуються магнітним квантовим числом m , описуються як лінійна комбінація станів $\Phi_{e(h)}^{nlm}(\vec{r})$

$$\Psi_{e(h)}^{jm}(\vec{r}) = \sum_n \sum_l c_{e(h)}^{jnlm} \Phi_{e(h)}^{nlm}(\vec{r}). \quad (4.3)$$

Через сферичну симетрію задачі ХФ електрона або дірки має вигляд

$$\Phi_{e(h)}^{nlm}(\vec{r}) = R_{e(h)}^{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (4.4)$$

де $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — сферичні функції, а радіальні функції $R_{e(h)}^{nl}(r)$ представляють собою лінійну комбінацію функцій Бесселя першого j_l та другого n_l роду [211]. Оскільки зовнішнє середовище (вакуум) має значне значення забороненої зони, для радіальної функції справедливі граничні умови Діріхле, тобто $R_{e(h)}^{nl}(r_1) = 0$. Енергії електронів і дірок без урахування ефектів електричного поля ($E_{e(h)0}$) обчислюються за допомогою граничних умов Бена Данієля-Дьюка при $r = r_0$.

Щоб визначити коефіцієнти розкладу $c_{e(h)}^{jnlm}$ з рівняння (4.3) та енергетичні спектри квазічастинок $E_{e(h)}^{jm}$ з (4.1) розв'язується розв'язати секулярне рівняння

$$\left| H_{e(h)}^{n'l',nl} - E_{e(h)}^{jm} \delta_{n,n'} \delta_{l,l'} \right| = 0, \quad (4.5)$$

де матричні елементи $H_{e(h)}^{nl,n'l'}$ мають вигляд

$$H_{e(h)}^{n'l',nl} = E_{e(h)0}^{nl} \delta_{n',n} \delta_{l',l} \mp eF (\alpha_{l,m} \delta_{l,l+1} + \beta_{l,m} \delta_{l,l-1}) U^{n'l',nl}, \quad (4.6)$$

тут

$$\alpha_{l,m} = \sqrt{\frac{l^2 - (m+1)^2}{(2l+3)(2l+1)}}, \quad (4.7)$$

$$\beta_{l,m} = \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1}} \quad (4.8)$$

i

$$U_{e(h)}^{n'l',nl} = \int_0^{r_2} r^3 R_{e(h)}^{n'l'}(r) R_{e(h)}^{nl}(r) dr. \quad (4.9)$$

Спектри та ХФ квазічастинок у наносистемі під впливом однорідного електричного поля повністю визначаються отриманими власними значеннями $E_{e(h)}^{jm}$ і власними векторами $c_{e(h)}^{jnlm}$ матриці $H^{nl,n'l'}$ для кожного m . Нові функції $\Psi_{e(h)}^{jm}(\vec{r})$ з фіксованим значенням магнітного квантового числа m , обчислюються з використанням розкладу за ХФ з однаковим m , як було показано у рівнянні (4.3). Стани електронів та дірок в системі характеризуються двома квантовими числами — j і m , де j відповідає номеру енергетичного рівня для фіксованого m . Для спрощення аналізу нові стани на графіках позначаються індексом l , який відповідає орбітальному квантовому числу ХФ без урахування збурень. Такі позначення, як $1s$, $1p, \dots$, дійсні лише за відсутності електричного поля ($F = 0$). Така атомарна нотація була використана для зручності, щоб мати візуальну інформацію про правила вибору для оптичних переходів.

Енергія кулонівської взаємодії електрон-дірка між станами i та f в ефективних одиницях Рідберга визначається інтегралом

$$E_b^{if} = \frac{2}{\varepsilon} \int_{\Omega_h} \int_{\Omega_e} \frac{|\Psi_{if}^{ex}(\vec{r}_e, \vec{r}_h)|^2}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} d^3\vec{r}_e d^3\vec{r}_h, \quad (4.10)$$

де $\Psi_{if}^{ex}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \Psi_e^i(\vec{r}_e) \Psi_h^i(\vec{r}_h)$, $\varepsilon = \sqrt{\varepsilon_{CdSe} \varepsilon_{ZnTe}}$ — середня діелектрична проникність, а Ω_e та Ω_h позначають області інтегрування для електрона та дірки відповідно. Оскільки магнітне квантове число дорівнює нулю, індекс m опущено

для спрощення запису. У цьому рівнянні ефективний радіус Рідберга (R_0) та ефективний радіус Бора (a_0) використовуються як одиниці енергії та довжини відповідно.

Сила осцилятора міжзонних квантових переходів, яка визначає інтенсивність ліній поглинання, може бути розрахована за допомогою такого виразу

$$f_{if} = \frac{E_p}{2E^{if}} \left| \int_{\Omega} \Psi_i^e(\vec{r}) \Psi_f^h(\vec{r}) d^3\vec{r} \right|^2, \quad (4.11)$$

де E_p – енергія Кейна, а $E^{if} = E_g + E_e^{j0} + E_h^{j0} - E_b^{if}$ – енергія міжзонного переходу. Тут $E_g = E_g^{CdSe} - V_h = E_g^{ZnTe} - V_e$ є ефективним енергетичним розривом між нижньою частиною провідної зони $CdSe$ та верхньою частиною валентної зони $ZnTe$.

Час життя є ще однією важливою характеристикою для дослідження екситонних структур, оскільки він визначає, як довго система залишається у збудженому стані перед поверненням до основного стану з випромінюванням фотона. Цей параметр має значення як для теоретичних, так і для експериментальних досліджень [212-216]. Сила осцилятора f_{if} , що визначає інтенсивність ліній поглинання, пов'язана з часом життя τ наступним співвідношенням

$$\tau_{if} = \frac{6\pi\epsilon_0 m_0 c^3 \hbar^2}{e^2 n f_{if} (E^{if})^2}, \quad (4.12)$$

де ϵ_0 – діелектрична проникність вакууму, c – швидкість світла у вакуумі, m_0 – маса вільного електрона, e – елементарний заряд електрона, E^{if} – енергія переходу розглянутої системи, f_{if} – сила осцилятора, n – показник заломлення матеріалу КТ.

4.1.2. Чисельний аналіз енергетичного спектру і сили осцилятора електрона та дірки

У чисельних розрахунках для електронних, діркових та екситонних станів з їхніми відповідними властивостями, обмежених в сферичних КТ $CdSe/ZnTe$ та $ZnTe/CdSe$ використані наступні фізичні параметри [217]:

$$r_0 = 3 \text{ nm}, r_1 = 5 \text{ nm}, V_e = 1.27 \text{ eV}, \text{ і } V_h = 0.84 \text{ eV};$$

$$\text{ZnTe: } m_e^* = 0.15m_0, m_h^* = 0.2m_0, E_g = 2.2 \text{ eV і } \varepsilon = 9.7;$$

$$\text{CdSe: } m_e^* = 0.13m_0, m_h^* = 0.45m_0, E_g = 1.75 \text{ eV і } \varepsilon = 10.6.$$

На рисунку 4.2 зображені радіальні розподіли густин ймовірності, що відповідають нормалізованим ХФ електрона та дірки ($|R_{e(h)}^{nl}|^2$) у КТ $CdSe/ZnTe$ II типу для кількох найнижчих енергетичних станів. Як видно з графіка, у випадках, коли енергія $E_{e(h)0}^{nl}$ менша за потенціальний бар'єр $V_{e(h)}$, то електрон або дірка локалізуються відповідно в області ядра або оболонки. Висока величина значень $|R_e^{2d}|^2$ в області оболонки та $|R_h^{2s}|^2$, $|R_h^{2p}|^2$, і $|R_h^{2d}|^2$ в області ядра вказує на те, що в цих випадках енергія стану перевищує потенціальний бар'єр для електрона V_e або для дірки V_h відповідно, що забезпечує можливість просторового розширення функції.

На рисунку 4.3 представлено залежності енергій електронів (рисунки 4.3а і 4.3б) та дірок (рисунки 4.3в і 4.3г) від напруженості прикладеного електричного поля в сферичних квантових КТ $CdSe/ZnTe$ та $ZnTe/CdSe$. Усі показані стани мають магнітне квантове число, рівне нулю. З графіків видно, що збільшення напруженості електричного поля призводить до зміщення рівнів енергії вниз, тобто в нижчий енергетичний діапазон. Цей ефект є більш вираженим для квазічастинок, локалізованих в оболонці, оскільки такі частинки зазнають меншої просторової обмеженості, що робить їх більш поляризованими під впливом поля. Коли носій заряду (електрон або дірка) локалізується переважно в області ядра, ХФ значно обмежена в просторі, що утруднює поляризацію системи навіть за великих значень

електричного поля. Це пояснює майже постійні енергетичні криві для електронів у КТ *CdSe/ZnTe* (рисунок 4.3а) та для дірок у *ZnTe/CdSe* (рисунок 4.3г), де електрони і дірки локалізовані в ядрі та слабо реагують на зовнішнє електричне поле.

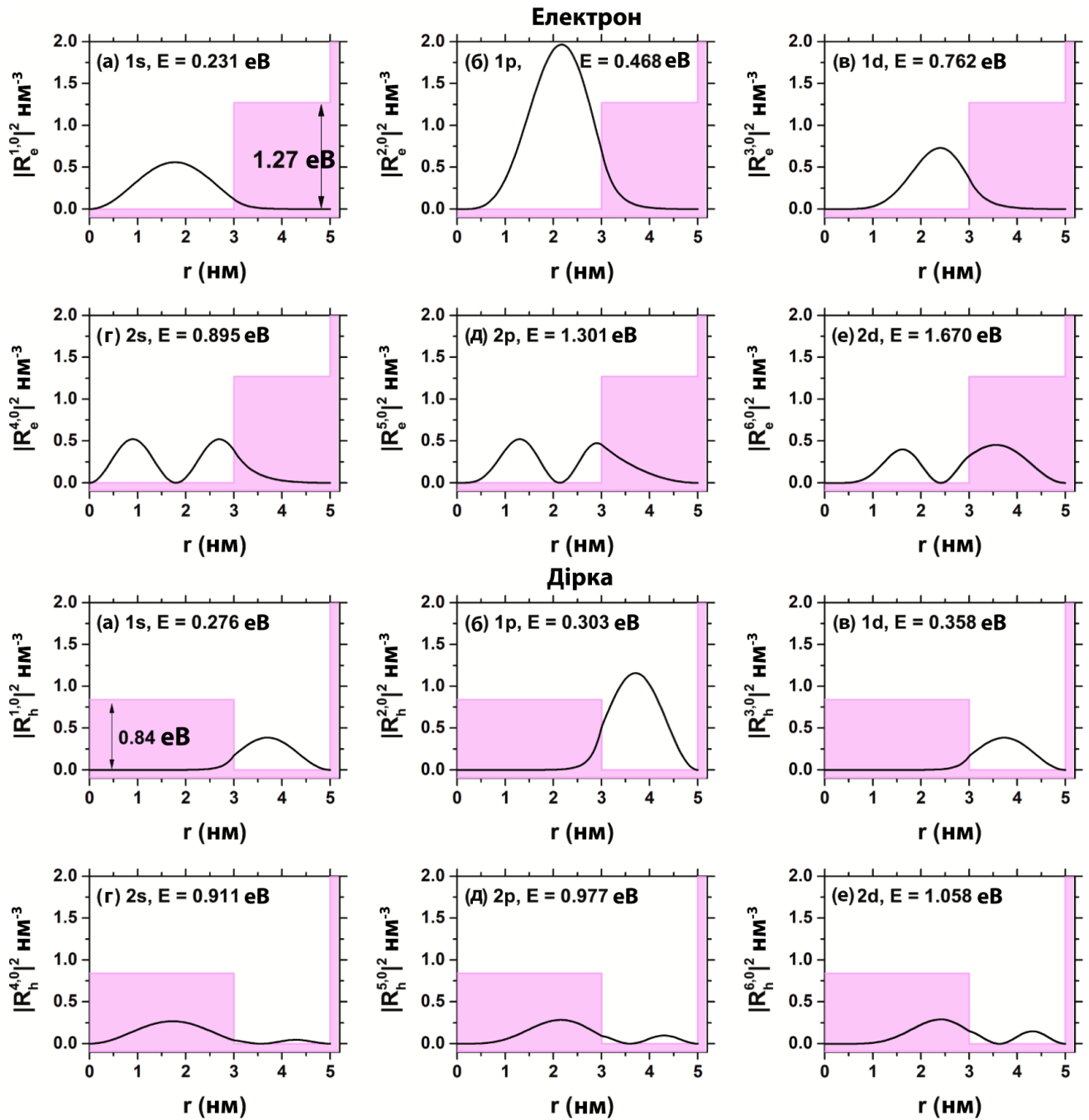


Рисунок 4.2. Електронний і дірковий радіальний розподіл густин імовірності ($|R_{e(h)}^{nl}(r)|^2$), що відповідає нормалізованій хвильовій функції в КТ *CdSe/ZnTe*.

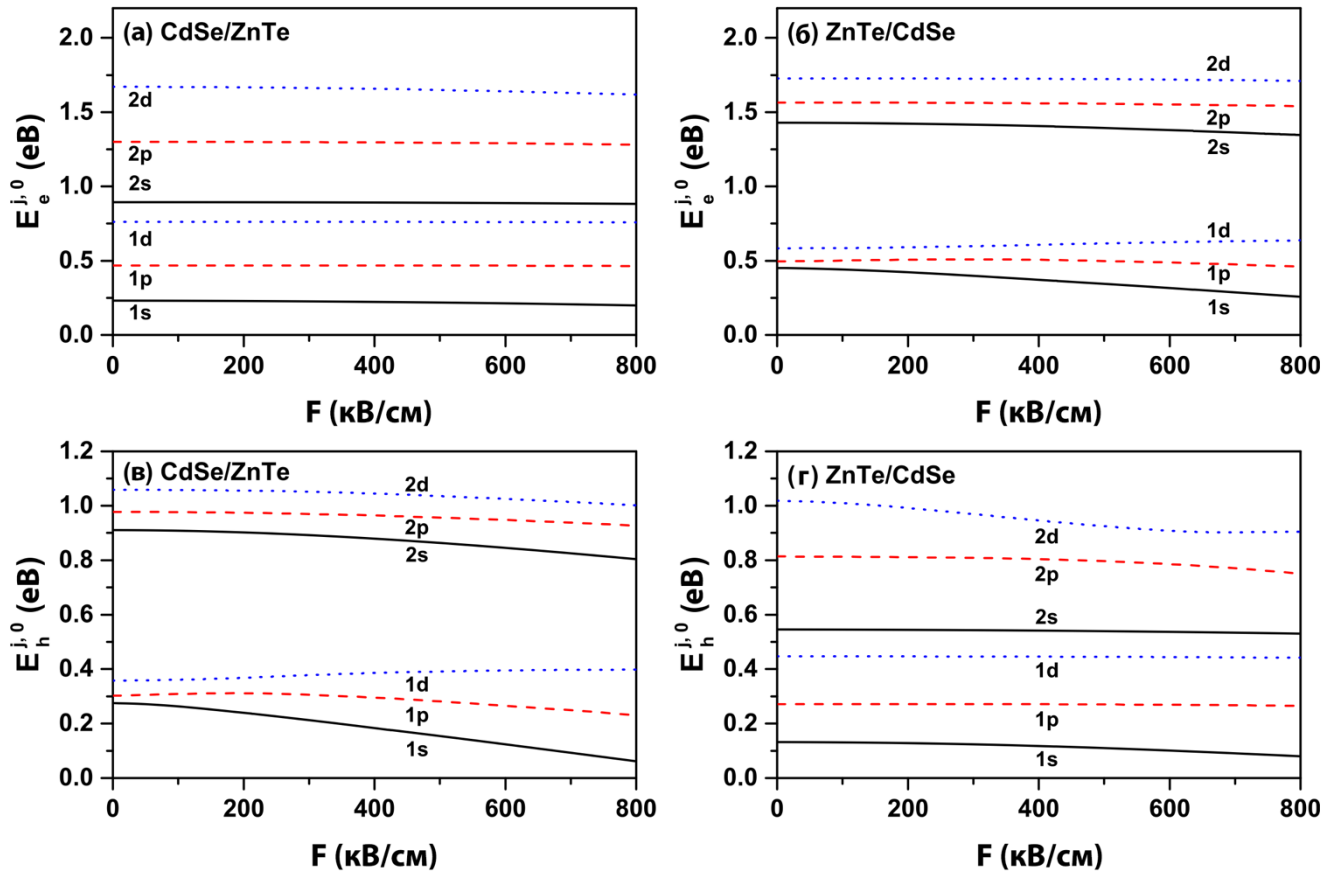


Рисунок 4.3. Залежності енергій електронів (а, б) та дірок (в, г) від напруженості прикладеного електричного поля в сферичних КТ *CdSe/ZnTe* (а, в) та *ZnTe/CdSe* (б, г).

На рисунку 4.4 представлено залежності енергій міжзонних переходів від напруженості електричного поля для обмеженої електронно-діркової пари в квантових точках *CdSe/ZnTe* та *ZnTe/CdSe*. Енергія квантового переходу між основними станами квазічастинок (E_{1s-1s}) лежить у ближньому інфрачервоному діапазоні спектра, що робить ці переходи перспективними для застосування в оптоелектронних пристроях, де важливе поглинання чи випромінювання у цьому спектральному діапазоні. Наступний дозволений перехід E_{1p-1p} відповідає нижній межі видимого спектра, однак при збільшенні напруженості електричного поля значення цього переходу знижується, переходячи в інфрачервоний діапазон при напруженості близько 0,3 МВ/см для *CdSe/ZnTe* та 0,5 МВ/см для *ZnTe/CdSe*. Це свідчить про можливість управління спектральними характеристиками системи за

допомогою зовнішнього електричного поля. Найвищий дозволений енергетичний перехід E_{1d-1d} залишається майже незмінним при зміні напруженості електричного поля і перебуває у видимій області спектра. Це свідчить про його стійкість до впливу електричного поля, що може бути корисним для стабільної роботи оптоелектронних пристроїв у видимому спектрі.

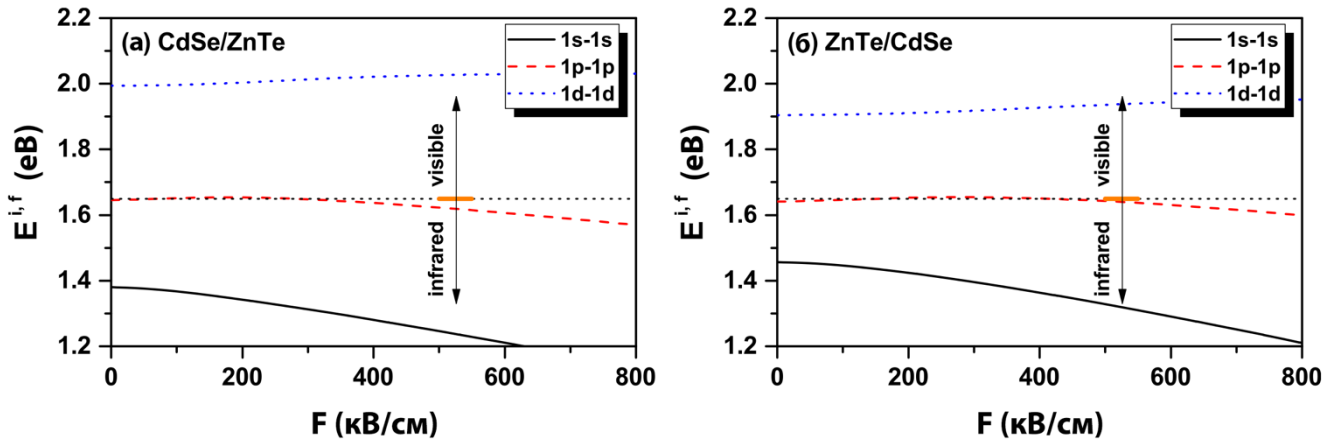


Рисунок 4.4. Залежності енергій міжзонних переходів від напруженості електричного поля для обмеженої електронно-діркової пари в КТ *CdSe/ZnTe* (а) та *ZnTe/CdSe* (б).

На рисунку 4.5 представлені результати для сили осцилятора міжзонних переходів залежно від напруженості прикладеного електричного поля для електронно-діркової пари, обмеженої в квантових точках *CdSe/ZnTe* (а, б) і *ZnTe/CdSe* (в, г). Рисунки 4.5а та 4.5в показують дозволених переходи при відсутності електричного поля ($F = 0$), тоді як рисунки 4.5(б) і 4.5(г) показують переходи, що є забороненими при $F = 0$, але стають дозволеними під дією електричного поля. При збільшенні напруженості електричного поля інтенсивність дозволених міжзонних переходів зменшується. Це явище пов'язане зі зменшенням перекриття ХФ електрона і дірки під впливом електричного поля, яке зміщує квазічастинки в протилежні просторові напрямки, як показано на рисунках 4.5а і 4.5в.

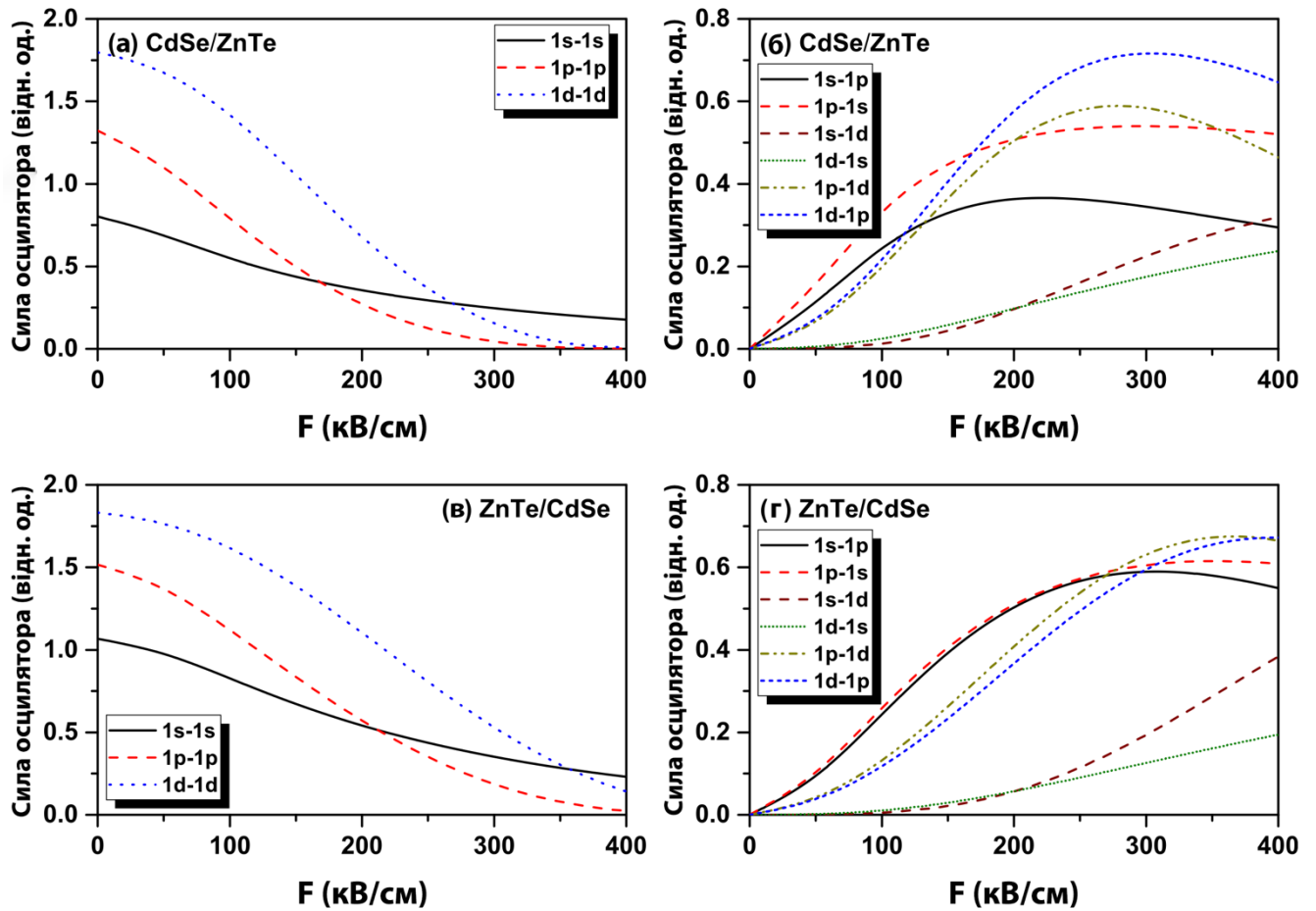


Рисунок 4.5. Залежність сили осцилятора міжзонних переходів від напруженості електричного поля для обмеженої електронно-діркової пари в КТ *CdSe/ZnTe* (а, б) і *ZnTe/CdSe* (в, г). Рисунки (а, б) показують результати для дозволених переходів при нульовому електричному полі, тоді як (в, г) зображують заборонені переходи при $F = 0$. Мітка $1s - 1p$, наприклад, означає стан $1s$ для електрона та стан $1p$ для дірки. Позначення $1s, 1p, \dots$ є дійсними лише при $F = 0$.

Важливо відзначити, що сила осцилятора для переходу $1s - 1s$ є найменш чутливою до впливу електричного поля через слабе перекриття ХФ електрона і дірки, що локалізовані у різних областях КТ. У той же час, для збуджених станів, таких як $1p - 1p$ і $1d - 1d$, спостерігається більше перекриття, через те, що ХФ електрона і дірки мають більшу проникність у області їхніх відповідних потенціальних бар'єрів, як показано на рисунку 4.2. Електричне поле також порушує симетрію ХФ, що робить можливими переходи, які були заборонені для

сферичної системи при $F = 0$. Це показано на рисунках 4.5б і 4.5г, де сила осцилятора заборонених переходів зростає із збільшенням напруженості електричного поля, демонструючи ефект Франка-Келдиша. Спочатку сила осцилятора збільшується через порушення симетрії, але при подальшому зростанні поля вона починає зменшуватися через зменшення перекриття ХФ. Варто зазначити, що переходи, які включають основний стан одного з носіїв і високозбуджені стани іншого, такі як $1s - 1d$ та $1d - 1s$, менш чутливі до впливу електричного поля. Навіть при напруженості до $F = 400$ кВ/см сила осцилятора для таких переходів не досягає максимальних значень, що спостерігаються для інших переходів. Це пояснюється тим, що чим більше розширений стан квазічастинки у просторі КТ, тим складніше впливати на його ХФ за допомогою електричного поля.

На рисунку 4.6 представлено залежність енергії зв'язку екситону в основному стані та середньої відстані між електроном і діркою (радіуса екситона) від напруженості електричного поля для пари електрон-дірка, обмеженої в КТ $CdSe/ZnTe$ та $ZnTe/CdSe$. Для обох структур розглядається основний стан електрона та дірки. Збільшення напруженості електричного поля призводить до зменшення перекриття хвильових функцій електрона та дірки, що, своєю чергою, спричиняє збільшення середньої відстані між ними (пунктирні лінії на рисунку). Таке зростання відстані між носіями заряду призводить до послаблення кулонівської взаємодії та, відповідно, до зменшення енергії зв'язку (суцільні лінії). Це явище особливо виражене у системі $CdSe/ZnTe$, де електрон знаходиться в області оболонки, а дірка — у ядрі. У такому випадку об'єм локалізації електрона більший, і система стає більш поляризованою під впливом електричного поля, ніж у випадку $ZnTe/CdSe$, де електрон локалізований у ядрі, а дірка — в оболонці. Наприклад, якщо об'єм утримання для електрона становить 36π нм³, то для дірки — 131π нм³. Цей факт підтверджує, що при фіксованому значенні прикладеного електричного поля енергія зв'язку для системи $ZnTe/CdSe$ нижча, ніж для системи $CdSe/ZnTe$. Отримані результати дуже добре узгоджуються з результатами роботи

[213] для КТ II типу $CdSe/CdTe$ з $r_0 = 1,95$ нм.

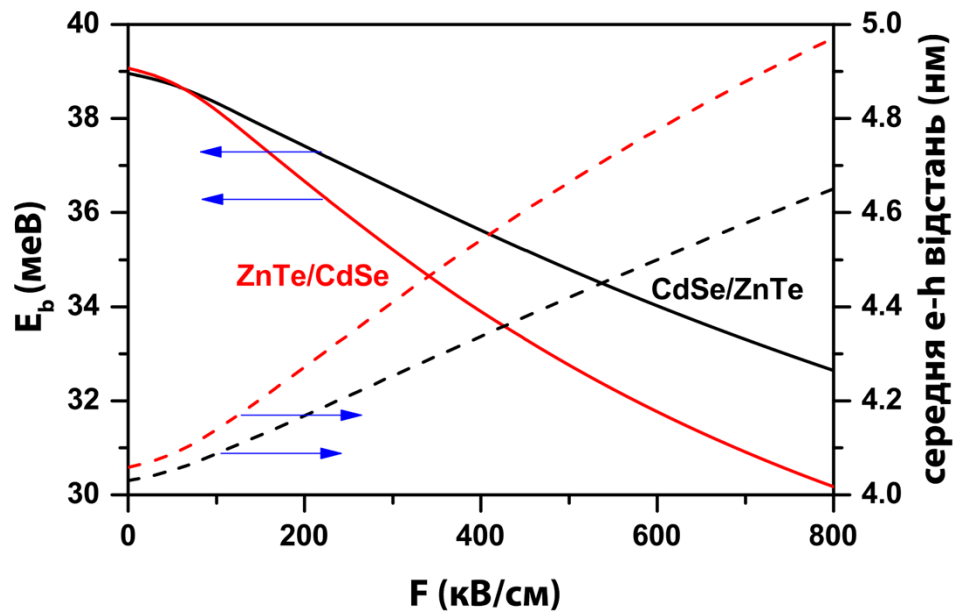


Рисунок 4.6. Залежності енергії зв'язку основного стану екситону та радіуса екситона (середня електрон-діркова відстань) від напруженості електричного поля для обмеженої електронно-діркової пари в КТ $CdSe/ZnTe$ та $ZnTe/CdSe$.

На рисунку 4.7 зображено залежності часу життя випромінювання для міжзонних переходів як функція напруженості електричного поля для електронно-діркової пари в КТ $CdSe/ZnTe$ (рисунок 4.7а) та $ZnTe/CdSe$ (рисунок 4.7б). З рівняння (4.11) випливає, що час життя випромінювання обернено пропорційний як силі осцилятора, так і енергії переходу. Тому зменшення сили осцилятора для переходів $1s - 1s$, $1p - 1p$ і $1d - 1d$ (рисунок 4.5) разом із незначними змінами в енергіях цих переходів (рисунок 4.4) призводить до збільшення часу життя випромінювання при зростанні електричного поля. При відсутності електричного поля порядок сил осцилятора та енергій переходів обернений до порядку часу життя випромінювання. Слід зауважити, що зміни в енергіях переходів з прикладеним електричним полем на рисунку 4.4 суттєво мінімальні для переходів $1p - 1p$ і $1d - 1d$ і не перевищують 25% для переходу $1s - 1s$, тоді як на рисунку 4.5а і 4.5б показана сильна залежність сили осцилятора від прикладеного електричного поля. Таким чином, основним чинником, який визначає зростання

часу життя випромінювання, є зміна сили осцилятора під впливом електричного поля. Також на рисунку 4.7 можна спостерігати перетини кривих часу життя, які відповідають перетинам кривих сили осцилятора на рисунку 4.5. Збільшення часу життя випромінювання вказує на те, що електричне поле сприяє стабілізації екситонних станів у КТ.

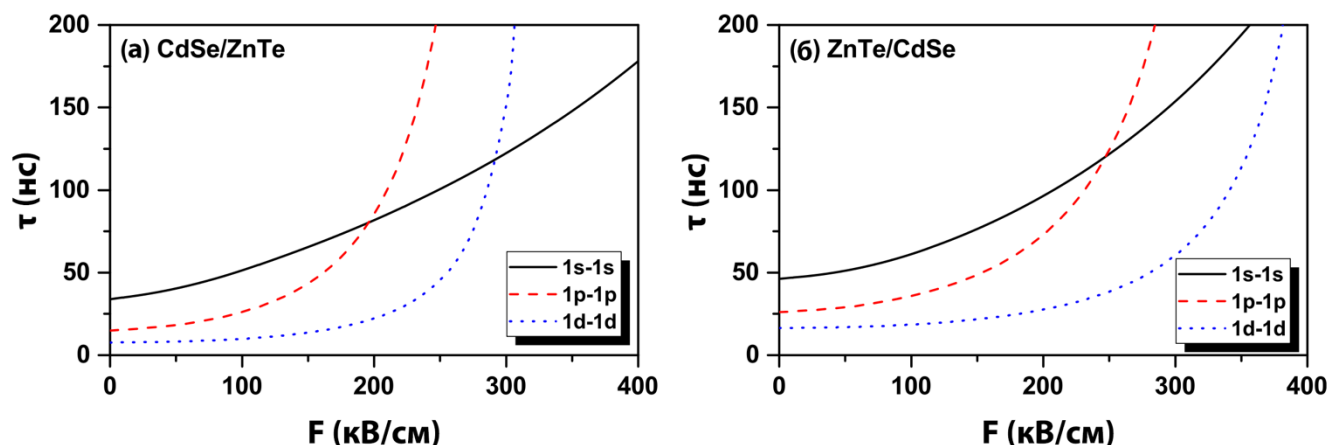


Рисунок 4.7. Залежності часу життя випромінювання міжзонних переходів від напруженості електричного поля для обмеженої електронно-діркової пари в КТ *CdSe/ZnTe* (а) та *ZnTe/CdSe* (б).

Отже, у цьому підпункті ми проаналізували вплив електричного поля на енергетичні рівні та ХФ основного ($1s$) та збуджених станів ($1p$, $1d$, $2s$, ...) електрона і дірки за допомогою матричного методу. На цій основі були розраховані осциляторна сила міжзонних переходів і час життя екситона як функції електричного поля. Результати показали, що електричне поле суттєво впливає на інтенсивність квантових переходів, зменшуючи інтенсивність дозволених переходів та збільшуючи інтенсивність заборонених. Енергії міжзонних переходів між найнижчими рівнями електронів і дірок зміщуються в область нижчих енергій спектру. Додатково, під дією електричного поля відбувається просторове розділення носіїв заряду, що, у свою чергу, призводить до зростання часу випромінювання екситона. Цей ефект важливий для розуміння стабільності та динаміки екситонів у таких системах.

4.2. Теоретичне моделювання впливу магнітного поля на оптичні властивості сферичних квантових точок II типу

4.2.1. Рівняння Шредінгера для електрона і дірки та метод його розв'язку

Досліджуються сферичні напівпровідникові КТ II типу $ZnTe/CdSe$ та обернена $CdSe/ZnTe$. Для вивчення впливу магнітного поля на енергетичний спектр та ХФ електрона і дірки розв'язується рівняння Шредінгера.

Рівняння Шредінгера для обмеженого електрона (дірки) у КТ під впливом зовнішнього магнітного поля має вигляд

$$H_{e(h)} \Psi_{jm}^{e(h)}(\vec{r}) = E_{jm}^{e(h)} \Psi_{jm}^{e(h)}(\vec{r}), \quad (4.13)$$

з гамільтоніаном $H_{e(h)}$

$$H_{e(h)} = \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \frac{1}{2\mu_{e(h)}(\vec{r})} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) + V_F(r, \theta) + U_{e(h)}(r), \quad (4.14)$$

де $\vec{A}$ — векторний потенціал, потенціал розмірного квантування $U_{e(h)}(r)$ і ефективна маса $\mu_{e(h)}(\vec{r})$ для КТ $CdSe/ZnTe$ мають вигляд

$$U_e(r) = \begin{cases} 0, & r \leq r_0 \\ V_e, & r_0 < r \leq r_1 \\ \infty, & r > r_1 \end{cases}, \quad (4.15)$$

$$U_h(r) = \begin{cases} V_h, & r \leq r_0 \\ 0, & r_0 < r \leq r_1 \\ \infty, & r > r_1 \end{cases}, \quad (4.16)$$

$$\mu_{e(h)}(\vec{r}) = \begin{cases} m_0^{e(h)}, & r \leq r_0 \\ m_1^{e(h)}, & r_0 < r \leq r_1 \end{cases}. \quad (4.17)$$

Для КТ $ZnTe/CdSe$ у формулі (4.14-4.15) необхідно поміняти місцями індекси e та h .

Беручи до уваги зв'язок між індукцією магнітного поля $\vec{B}$ та векторним потенціалом $\vec{A}$: $\vec{A} = [\vec{r} \times \vec{B}]/2$, гамільтоніан (4.13) переписується у вигляді

$$H_{e(h)} = -\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{\mu_{e(h)}(\vec{r})} \vec{\nabla} + \frac{eB}{2c\mu_{e(h)}(\vec{r})} L_z + \frac{e^2 B^2 r^2 \sin^2 \theta}{8c^2 \mu_{e(h)}(\vec{r})} + U_{e(h)}(r). \quad (4.18)$$

Для розв'язання рівняння (4.12) ХФ розкладаються за повним набором точних розв'язків рівняння Шредінгера для електрона (або дірки) у цій же КТ без магнітних полів

$$\Psi_{jm}^{e(h)}(\vec{r}) = \sum_n \sum_l c_{jnlm}^{e(h)} \Phi_{nlm}^{e(h)}(\vec{r}). \quad (4.19)$$

Внаслідок сферичної симетрії задачі ХФ електрона (дірки) набуде вигляду $\Phi_{nlm}^{e(h)}(\vec{r}) = R_{nl}^{e(h)}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$, де $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ – сферичні функції, а радіальні частини $R_{nl}^{e(h)}(r)$ описуються як лінійна комбінація функцій Бесселя першого j_l та другого роду n_l . Враховуючи велику ширину забороненої зони зовнішнього середовища маємо $R_{nl}^{e(h)(1)}(r_1) = 0$. Енергетичні спектри квазічастинок $E_{nl}^{e(h)}$ знайдено за допомогою граничних умов Бена–Денієла–Дьюка:

$$\left. \begin{aligned} R_{nl}^{e,h(0)}(r_0) &= R_{nl}^{e,h(1)}(r_0). \\ \frac{1}{m_0} \frac{dR_{nl}^{e,h(0)}(r)}{dr} \Big|_{r=r_0} &= \frac{1}{m_1} \frac{dR_{nl}^{e,h(1)}(r)}{dr} \Big|_{r=r_0} \end{aligned} \right\}. \quad (4.20)$$

Матричним методом з секулярного рівняння $\left| H_{e(h)}^{n'l',nl} - E_{e(h)}^{jm} \delta_{n,n'} \delta_{l,l'} \right| = 0$ отримано коефіцієнти розкладу $c_{jnlm}^{e(h)}$ та енергетичні спектри квазічастинок $E_{jm}^{e(h)}$. Нові функції $\Psi_{jm}^{e(h)}(\vec{r})$ із фіксованим значенням магнітного квантового числа отримується з розкладу (4.18) за хвильовими функціями $\Phi_{nlm}^{e(h)}(\vec{r})$ з тим самим m .

Кожний новий електронний і дірковий стан описується двома квантовими числами j та m , де j відповідає номеру енергетичного рівня для фіксованого m .

Енергія міжзонного переходу визначається виразом

$$E_{e-h} = E_g^* + E_i^e + E_i^h - E_{ex}^b, \quad (4.21)$$

де $E_g^* = E_g^{CdSe} - V_h = E_g^{ZnTe} - V_e$ є ефективним енергетичним розривом між нижньою зоною провідності $CdSe$ та верхньою валентною зоною $ZnTe$ (рисунок 4.8), E_{ex}^b – енергія кулонівської взаємодії електрона та дірки.

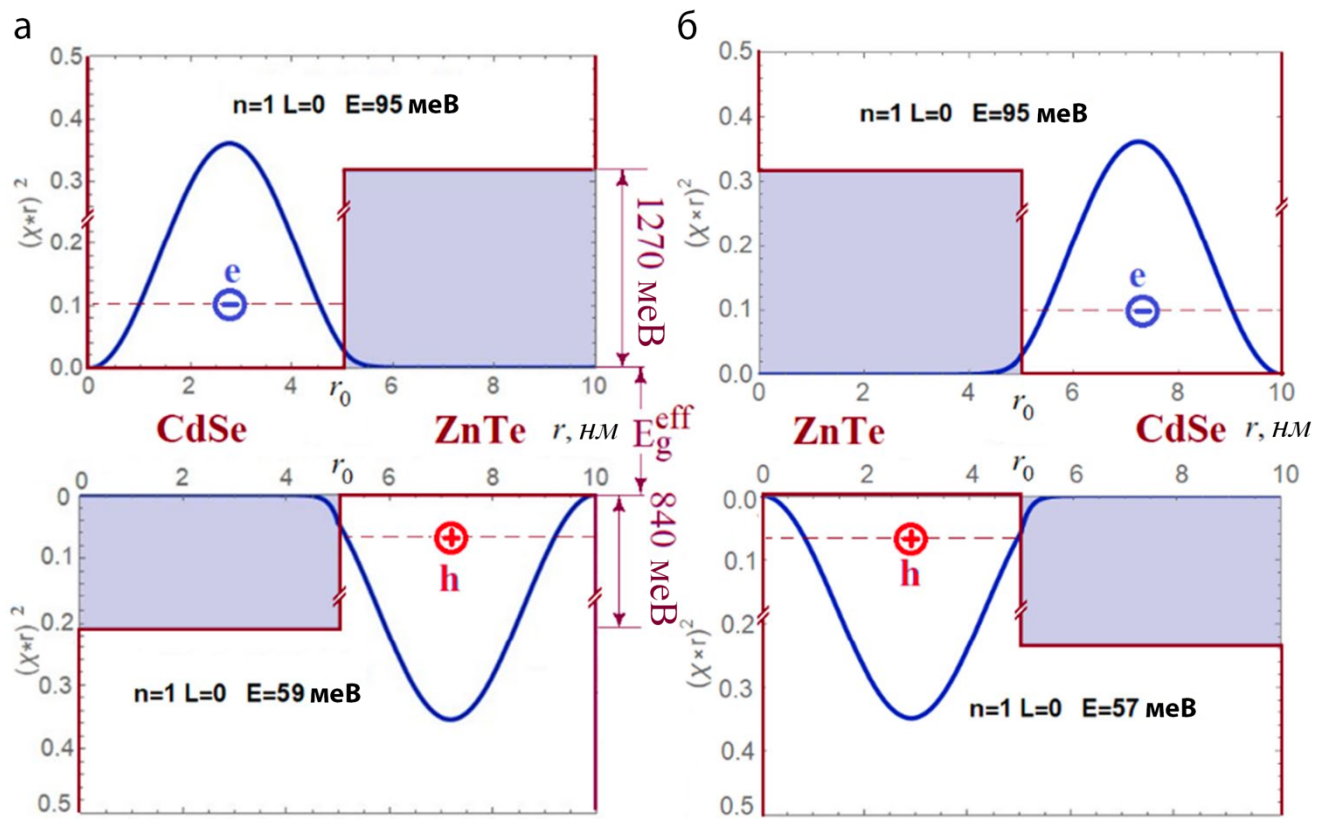


Рисунок 4.8. Схема потенціальної енергії електрона та дірки в КТ $CdSe/ZnTe$ та $ZnTe/CdSe$ II типу.

Енергія кулонівської взаємодії між електроном і діркою між станами i і f визначається наступним інтегралом

$$E_b^{if} = \frac{2}{\varepsilon} \int_{\Omega_h} \int_{\Omega_e} \frac{|\Psi_{if}^{ex}(\vec{r}_e, \vec{r}_h)|^2}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} d^3\vec{r}_e d^3\vec{r}_h, \quad (4.22)$$

де $\Psi_{if}^{ex}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \Psi_i^e(\vec{r}_e)\Psi_j^h(\vec{r}_h)$, $\varepsilon = \sqrt{\varepsilon_{CdSe}\varepsilon_{ZnTe}}$ – середня діелектрична проникність.

Використовуючи ХФ та енергії квантового переходу, було досліджено коефіцієнт оптичного поглинання КТ. Загальний вигляд коефіцієнта поглинання екситона окремої КТ описується формулою [218]

$$\alpha(\hbar\omega) \propto \sum_k f_k \delta_k(\hbar\omega - E_{e-h}). \quad (4.23)$$

Сила осцилятора міжзонних квантових переходів, яка визначає інтенсивність ліній поглинання, може бути отримана [169, 219] як

$$f_{ij} = \frac{E_p}{2E_{e-h}} |M_{ij}|^2, \quad (4.24)$$

де $M_{ij} = \int_V \Psi_i^{e*}(\vec{r})\Psi_j^h(\vec{r})d\vec{r}$ – дипольний момент квантового переходу, E_p – енергія Кейна, яка становить 21 еВ для *CdSe* [148] та 19,1 еВ для *ZnTe* [219].

4.2.2. Чисельний аналіз енергетичного спектру і міжзонних оптичних квантових переходів електрона та дірки

Комп'ютерні розрахунки виконані для наноструктур *CdSe/ZnTe* та *ZnTe/CdSe* з наступними фізичними параметрами [217]:

$$r_0 = 10 - 20 \text{ нм}, r_1 - r_0 = 5 \text{ нм}, V_e = 1270 \text{ меВ}, V_h = 840 \text{ меВ};$$

$$\text{ZnTe: } m_e = 0.15, m_h = 0.2, E_g = 2.2 \text{ еВ}, \varepsilon_{\text{ZnTe}} = 9.7;$$

$$\text{CdSe: } m_e = 0.13, m_h = 0.45, E_g = 1.75 \text{ еВ}, \varepsilon_{\text{CdSe}} = 10.6.$$

Для розрахунку впливу магнітного поля в розкладі (4.18) було враховано не

менше 20 доданків.

На рисунку 4.9 показано, як змінюються енергії електронів і дірок у КТ $CdSe/ZnTe$ та $ZnTe/CdSe$ від величини індукції магнітного поля.

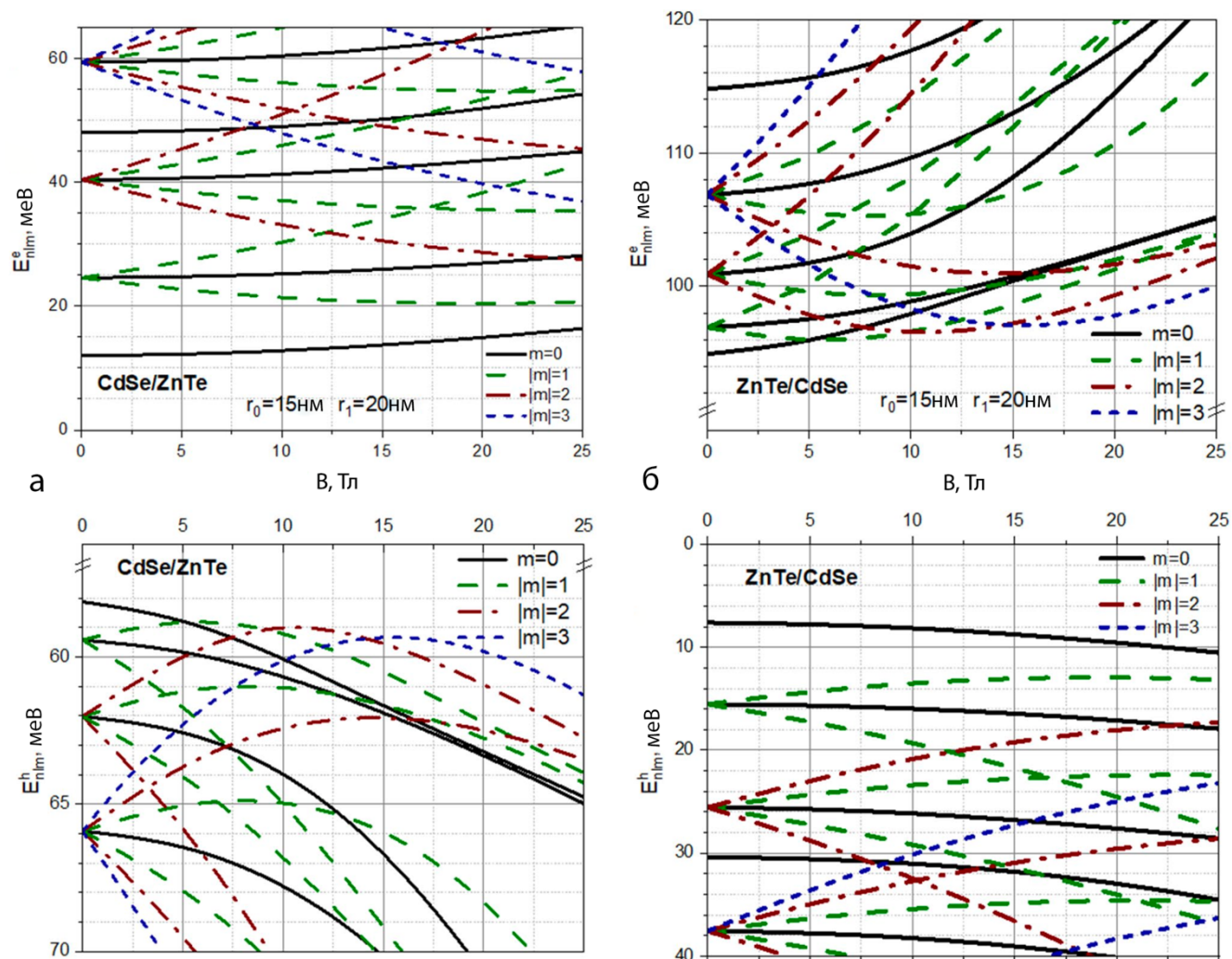


Рисунок 4.9. Енергія електронів і дірок у КТ $CdSe/ZnTe$ (а) і $ZnTe/CdSe$ (б) як функція індукції магнітного поля ($r_0 = 15 \text{ nm}$, $r_1 - r_0 = 5 \text{ nm}$).

Рисунок 4.9 показує, що орбітальне виродження з кратністю $(2l + 1)$ усувається під впливом магнітного поля, що призводить до розщеплення енергетичних рівнів. Наприклад, перший збуджений стан для магнітного квантового числа m може набувати значень 1, 0 і -1. При збільшенні магнітного поля енергія станів з $m > 0$ зростає монотонно, тоді як для станів з $m < 0$ енергія змінюється немонотонно через вплив лінійних і квадратичних членів для

магнітного поля в гамільтоніані (4.17). Також видно, що для частинок, локалізованих у оболонці, швидкість зміни енергії більша при великих значеннях $|m||m||m|$, що призводить до перетину енергетичних рівнів і формування основного стану з різними значеннями магнітних чисел. Також варто зазначити, що для квазічастинок, локалізованих в оболонці, швидкість зміни енергії більша при великих значеннях $|m|$, що призводить до перетину всіх нижчих енергетичних рівнів і тому основний стан утворюється зі станів з різними магнітними числами.

На рисунку 4.10 показано, як змінюється розподіл густини ймовірності $|\Psi_{10}(\vec{r})|^2$ для електрона та дірки у КТ з радіусами $r_0 = 20$ нм і $r_1 = 25$ нм під впливом магнітного поля. Верхній ряд зображень представляє систему $ZnTe/CdSe$, а нижній ряд — $CdSe/ZnTe$.

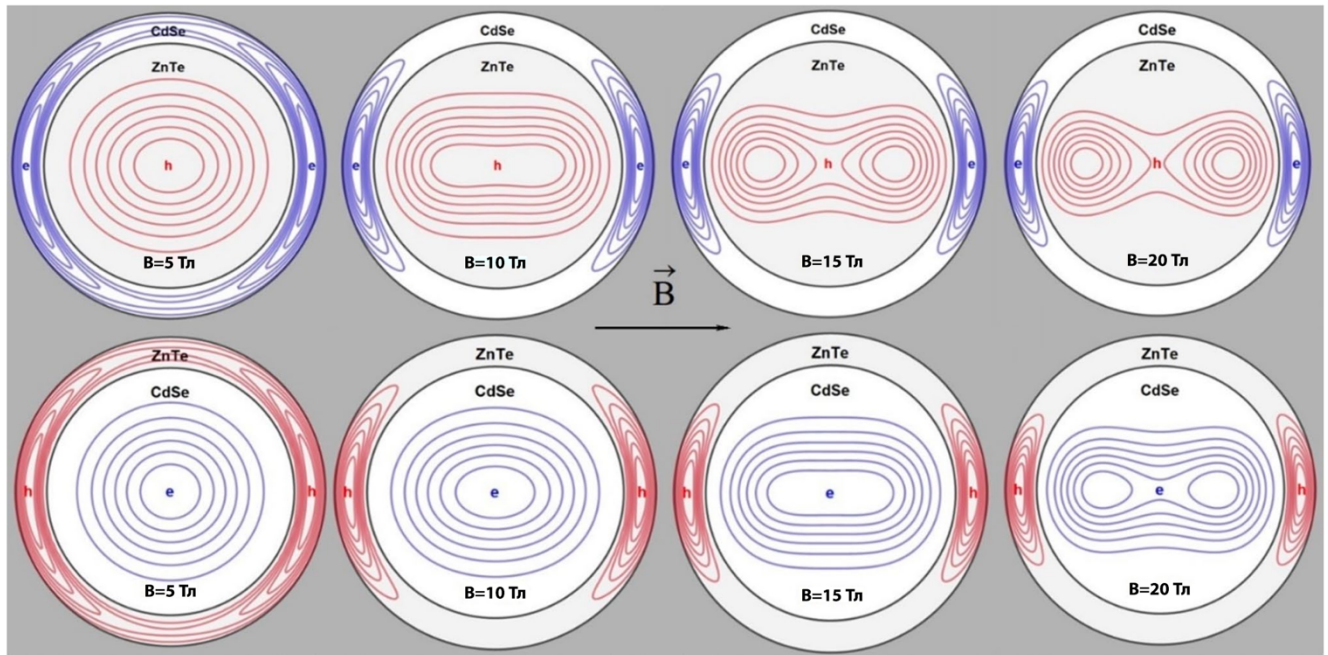


Рисунок 4.10. Еволюція розподілу густини ймовірності $|\Psi_{10}(\vec{r})|^2$ для електрона та дірки в КТ під дією магнітного поля (верхній рядок — $ZnTe/CdSe$ нижній рядок — $CdSe/ZnTe$).

Магнітне поле значно деформує розподіл густини електронів і дірок. Із зростанням індукції магнітного поля розподіл густини ймовірності зосереджується в областях поблизу кутів $\theta = 0$ та $\theta = \pi$, тоді як поблизу $\theta = \pi/2$ густина

зменшується. Особливо помітна деформація спостерігається для ХФ основного стану $1s$, що локалізована в оболонці. Під впливом магнітного поля цей стан наближається до форми, характерної для збудженого стану $1p$, що призводить до зближення енергетичних рівнів станів $1s$ і $1p$ зі зростанням магнітного поля.

Залежності квадрата дипольного моменту квантового переходу $|M_{10,10}|^2$ від магнітного поля для КТ II типу $CdSe/ZnTe$ та $ZnTe/CdSe$ з різними радіусами ядра представлено на рисунку 4.11. Ці залежності демонструють немонотонну поведінку, що обумовлена комплексним впливом магнітного поля на перекриття ХФ електрона та дірки в КТ. При застосуванні магнітного поля ХФ електрона та дірки змінюють форму, що призводить до збільшення їх перекриття в напрямку, паралельному до індукції магнітного поля, і зменшення перекриття в напрямку, перпендикулярному до поля. Така деформація особливо помітна для структур з більшим розміром ядра, де перекриття хвильових функцій у вихідному стані (без магнітного поля) є дуже малим. Проте під дією магнітного поля перекриття збільшується, що призводить до зростання значення $|M_{10,10}|^2$.

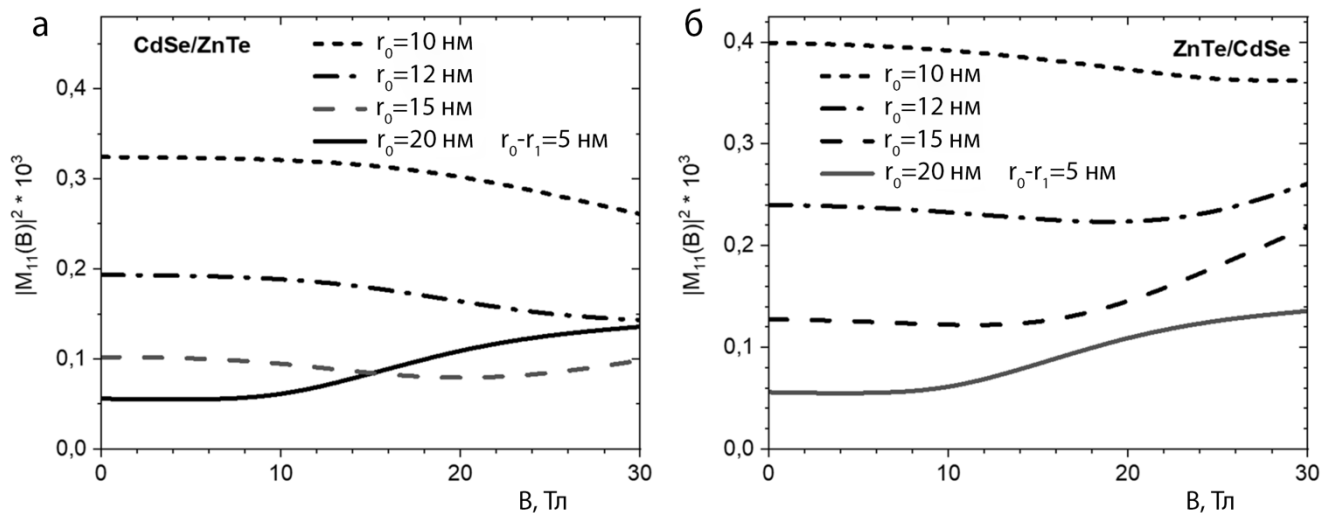


Рисунок 4.11. Залежність величини $|M_{10,10}|^2$ від індукції магнітного поля для КТ II типу $CdSe/ZnTe$ (а) та $ZnTe/CdSe$ (б) з різними радіусами ядра $r_0 = 12, 15, 20$ нм при фіксованій товщині оболонки $r_1 - r_0 = 5$ нм.

Графік залежності енергії зв'язку екситону E_{ex}^b від величини індукції

магнітного поля для КТ $CdSe/ZnTe$ (штрихові лінії) та $ZnTe/CdSe$ (суцільні лінії) з радіусами ядра $r_0 = 12, 15, 20$ нм та шириною оболонки $r_1 - r_0 = 5$ нм наведена на рисунку 4.12. Із графіка видно, що зі збільшенням індукції магнітного поля енергія зв'язку екситону зростає для обох типів КТ. Це зростання пояснюється впливом магнітного поля на перекриття ХФ електрона та дірки, що посилює кулонівську взаємодію між ними. Варто зазначити, що для КТ з більшим радіусом ядра енергія взаємодії електрон–дірка є нижчою, оскільки просторове розділення між електроном і діркою збільшується. Однак при цьому вплив магнітного поля на енергію зв'язку є більш вираженим, що свідчить про значну роль магнітного поля в зміні властивостей наноструктур із збільшеними розмірами.

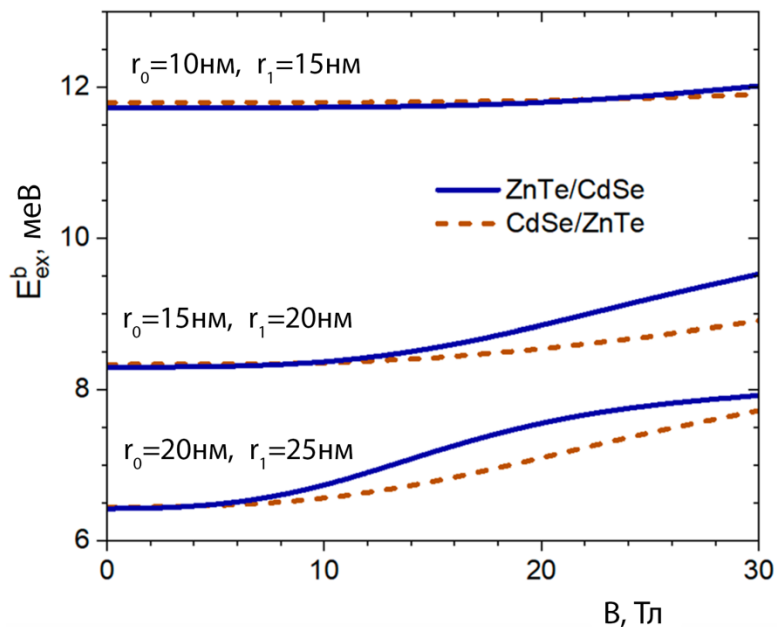


Рисунок 4.12. Залежність енергії зв'язку екситона $E_{ex}^b(B)$ від індукції магнітного поля для КТ $CdSe/ZnTe$ (штрихові лінії) та $ZnTe/CdSe$ (суцільні лінії) з радіусами ядра $r_0 = 12, 15, 20$ нм та шириною оболонки $r_1 - r_0 = 5$ нм.

Для оцінки можливості спостереження осциляцій Ааронова–Бома під час міжзонного поглинання було розглянуто залежність енергій квантових переходів між різними станами електрона та дірки, що представлено на рисунку 4.13. З рисунку 4.13а та 4.13б видно, що для квантових переходів, дозволених правилами

відбору, з $\Delta m = 0$ осциляції Ааронова-Бома не спостерігаються. Проте осциляції Ааронова-Бома спостерігаються у квантових переходах між основним станом квазічастинки, розташованої в ядрі, і станами з $m = 0, -1, -2, -3, \dots$ для квазічастинок, локалізованих у оболонці (рисунки 4.13в і 4.13г). Хоча ці переходи формально заборонені правилами відбору за кутовим моментом, вони стають можливими в реальних умовах, де завжди присутні певні дефекти або відхилення від ідеальної обертальної симетрії КТ. Це призводить до того, що навіть за умови порушення симетрії та при підвищених температурах можна спостерігати осциляції Ааронова-Бома в міжзонних переходах.

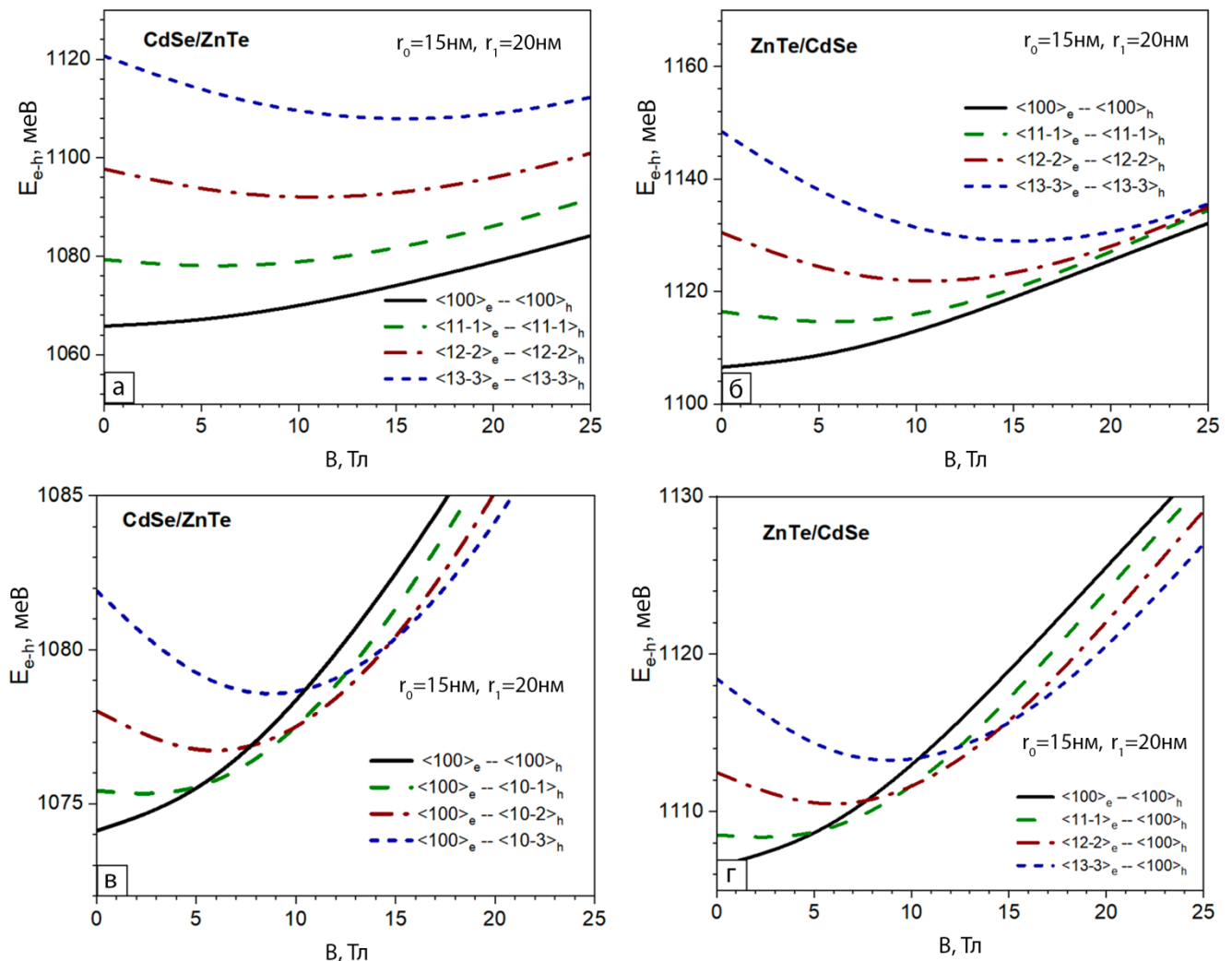


Рисунок 4.13. Залежність енергій міжзонних переходів $E_{e-h}(B)$ від індукції магнітного поля для КТ $CdSe/ZnTe$ (а, в) та $ZnTe/CdSe$ (б, г).

Слід зазначити, що ефекти, які спостерігаються в даній гетероструктурі при введенні зовнішнього магнітного поля, не можуть бути спостережені просто при зміні немагнітного напівпровідника на магнітний. Наприклад, комбінація гетероструктури «ядро-оболонка» та зовнішнього магнітного поля викликає осциляції основного стану для електрона або дірки, залежно від того, який матеріал знаходиться в області оболонки. Наявність зовнішнього магнітного поля на тривимірній сферично-симетричній структурі порушує сферичну симетрію задачі, зберігаючи симетрію відносно площини, перпендикулярної прикладеному магнітному полю. Це також не можна спостерігати, просто змінивши тип напівпровідника.

Розглянуті напівпровідникові КТ були предметом дослідження в останні роки з різних причин. По-перше, цей тип КТ «ядро-оболонка», також відомий як колоїдні КТ, легко виготовити шляхом додавання напівпровідника в матеріал, що виконує роль нескінченного потенціального бар'єра та широким можливостям застосування в таких галузях, як біофізика, оптоелектроніка, комунікації, поглинання та випромінювання енергії, а також сонячна енергетика. У цих наносистемах електрон і дірка розташовані в різних областях: електрон локалізується в *CdSe*, тоді як дірка обмежена в *ZnTe*. Залежно від того, який матеріал утворює ядро, а який оболонку, можна спостерігати осциляції основного стану електрона, якщо ядро складається з *CdSe*, або дірки, якщо оболонка складається з *ZnTe*. Просторове розділення електрона та дірки в таких системах сприяє утворенню так званих просторово непрямих екситонних станів. Такі екситони мають тривалий час життя, оскільки перекриття ХФ електрона і дірки є малим. Це також зумовлює низьку енергію зв'язку екситонів, що є ключовим фактором для багатьох технологічних застосувань цих гетероструктур. Описані особливості відкривають нові перспективи для подальших наукових досліджень, спрямованих на розширення можливостей застосування гетероструктур типу «ядро-оболонка» в сучасних технологіях.

Отже, у цьому підпункті показано, що з ростом індукції магнітного поля

спостерігається збільшення перекриття ХФ і кулонівської взаємодії між електроном і діркою. Встановлено, що під дією магнітного поля сферична симетрія системи порушується і відбувається зняття виродження енергетичного спектра за магнітним квантовим числом. Виявлено, що дозволені правилами відбору міжзонні квантові переходи не демонструють осциляцій Ааронова–Бома, тоді як для заборонених переходів такі осциляції можливі.

Висновки до розділу 4

Було теоретично досліджено вплив електричного та магнітного полів на енергетичні рівні у сферичних КТ ядро-оболонка $CdSe/ZnTe$ та $ZnTe/CdSe$ II типу, використовуючи матричний метод в наближенні ефективної маси для знаходження енергетичних рівнів і ХФ електрона та дірки. Було виявлено, що зі збільшенням індукції магнітного поля зростають перекриття ХФ і енергія кулонівської взаємодії між електроном і діркою. Енергії міжзонних квантових переходів, дозволених правилами відбору, не містять осциляцій Ааронова–Бома, тоді як такі осциляції можливі для заборонених переходів. Таким чином, за реальних експериментальних умов, у відсутності досконалої симетрії, у низькоенергетичній частині спектра можуть з'являтися рівні, які утворюються зі станів з різними значеннями магнітного квантового числа. Це може мати значення для кількісного розуміння майбутніх експериментальних робіт, пов'язаних з екситонами в КТ.

Встановлено, що під дією магнітного поля порушується сферична симетрія системи, що призводить до зняття виродження енергетичних рівнів за магнітним квантовим числом. Для станів з магнітним квантовим числом $m \geq 0$ енергія квазічастинок монотонно зростає зі збільшенням індукції магнітного поля, у той час як для станів з $m < 0$ залежність енергії від поля набуває немонотонного характеру. Крім того, при збільшенні індукції магнітного поля енергія основного стану дірки в $CdSe/ZnTe$ і енергія основного стану електрона в $ZnTe/CdSe$

формується по черзі з найнижчих станів з $m = 0, -1, -2, \dots$, тобто спостерігається ефект Ааронова–Бома. Так як магнітне поле впливає на перекриття ХФ електрона та дірки, сила осцилятора квантових переходів також стає залежною від індукції магнітного поля.

Отримано, що електричне поле призводить до зниження енергетичних рівнів (зміщення вниз), особливо для частинок, локалізованих в оболонці, де просторове обмеження є меншим.

Показано, що за відсутності електричного поля та завдяки сферичній симетрії наносистеми дозволені лише квантові переходи з $\Delta l = 0$ ($1s_e - 1s_h$, $1p_e - 1p_h$, $1d_e - 1d_h$, $1s_e - 2s_h \dots$). В умовах електричного поля спостерігається суттєве зниження інтенсивності дозволених міжзонних переходів і одночасне збільшення інтенсивності заборонених $1s_e - 1p_h$, $1s_e - 1d_h, \dots$. Це зумовлено порушенням сферичної симетрії системи, що робить можливими переходи, які були заборонені у відсутності поля. Особливо важливим є те, що інтенсивність дозволених переходів, таких як $1s_e - 1s_h$, знижується через зменшення перекриття ХФ, тоді як для збуджених станів $1p_e - 1p_h$ та $1d_e - 1d_h$ спостерігається більша стійкість до змін напруженості електричного поля.

Зі збільшенням напруженості електричного поля відбувається зменшення кулонівської взаємодії між електроном та діркою, що супроводжується збільшенням середньої відстані між ними. Це явище особливо помітне для структури $CdSe/ZnTe$, де електрони локалізовані в оболонці, а дірки – в ядрі, що забезпечує більшу поляризованість системи. Зменшення сили осцилятора та енергії квантових переходів, спричинене дією електричного поля, призводить до зростання часу життя екситона. Це підвищує стабільність екситонних станів, що важливо для створення оптоелектронних пристроїв з контрольованими параметрами.

Виявлена чутливість КТ II типу до електричного поля та можливість регулювання оптичних властивостей забезпечують перспективи для використання таких структур у різних галузях, включаючи фотоніку, оптоелектроніку, сенсори,

сонячну енергетику та біомедицину. Природа непрямих екситонів з довгим часом життя, обумовлена просторовим розділенням електронів і дірок, робить ці гетероструктури перспективними для технологій, що потребують стійких екситонних станів.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ І ВИСНОВКИ

Дослідження впливу електричного поля на оптичні властивості КТ типу $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_yGa_{1-y}As$ показало, що електричне поле значно впливає на енергетичні стани системи, причому основні стани реагують набагато сильніше, ніж збуджені. Також спостерігається явище антикросингу енергетичних рівнів, що виникає через зняття виродження за магнітним квантовим числом, яке призводить до складної взаємодії між рівнями.

Енергія зв'язку електрона з нецентральною домішкою змінюється під впливом зовнішніх полів і розмірів КТ. Виявлено, що магнітне поле підвищує енергію зв'язку, тоді як електричне поле, залежно від свого напрямку, може як збільшувати, так і зменшувати її. Максимальна енергія зв'язку спостерігається, коли домішка розташована в центрі потенціальної ями, і зменшується зі збільшенням її розміру.

Дослідження показали, що у відсутності зовнішніх полів ПФД має кілька піків, максимальні значення яких спостерігаються, коли домішка розташована в центрі потенціальної ями. Без електричного поля основний внесок у ПФД забезпечує перехід $1s - 1p^0$, але зі збільшенням інтенсивності електричного поля суттєво зростає і пік для переходу $1s - 1s^0$. Увімкнення електричного поля спричиняє зміщення піків ПФД у сторону нижчих енергій. Крім того, зі зменшенням ширини потенціальної ями ПФД зменшується, що свідчить про залежність оптичних властивостей від геометричних параметрів КТ. Таким чином, як електричне поле, так і розміри потенціальної ями значно впливають на розподіл і інтенсивність піків ПФД, визначаючи оптичні характеристики наноструктури.

Дослідження впливу магнітного поля на однаємну БСКТ показало, що для структур із малим радіусом ядра цей вплив незначний. Однак у наноструктурах з більшим радіусом магнітне поле викликає антикросинги енергетичних рівнів, подібно до впливу електричного поля. Зі збільшенням магнітного поля енергія електронів підвищується, а наявність домішки зміщує всі стани з домішкою до

нижчих енергій порівняно зі станами без домішки. Енергії та ХФ були обчислені матричним методом і підтверджені методом скінченних елементів, що показало високу точність результатів.

Аналіз впливу магнітного поля і розташування донорної домішки на ПФД показало, що при центральному положенні домішки магнітне поле зміщує пік ПФД у низькоенергетичну область. При нецентральному положенні домішки ПФД містить кілька піків, пов'язаних з внутрішньозонними переходами. Збільшення розміру ядра КТ призводить до злиття двох найнижчих піків та збільшення максимального значення ПФД.

Дослідження впливу магнітного поля на двоямну БСКТ $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_yGa_{1-y}As$ показало, що ця наносистема дуже чутлива до домішок і зовнішніх полів у зоні антикросингу енергетичних рівнів. Зменшення ширини зовнішньої потенціальної ями зумовлює зміщення піків ПФД та КП у бік вищих енергій, підсилюючи вплив переходів у вищі збуджені стани на оптичні властивості КТ. Встановлено, що магнітне поле з індукцією 10-15 Тл впливає на оптичні властивості аналогічно до зменшення товщини зовнішньої оболонки.

Вивчення впливу електричного та магнітного полів на силу осцилятора в КТ без домішки показало, що без магнітного поля сила осцилятора дозволених переходів ($1s - 1p$, $1p - 1d$) зменшується зі збільшенням електричного поля, тоді як сила для переходу $1s - 1f$, раніше забороненого, зростає, що свідчить про руйнування симетрії системи. Додавання магнітного поля ускладнює цю залежність, призводячи до немонотонних змін сили осцилятора. У цьому випадку сила переходу $1s - 1p$ зменшується порівняно з переходами в інші збуджені стани ($1s - 1d$ і $1s - 1f$), що також вказує на зміну симетрії та енергетичної структури системи під впливом магнітного поля.

Аналіз лінійного та нелінійного КП також демонструє залежність від розміру наносистеми, зовнішніх полів та домішок. Отримано, що у менших наноструктурах домінує лінійний КП, оскільки ефект магнітного поля тут менш значний. Натомість, у більших структурах, при посиленні магнітного поля, нелінійний КП

суттєво зростає, що свідчить про підвищену чутливість до магнітних впливів та про зростання нелінійних ефектів у системі. У випадку наявності нецентральної домішки КП значно зменшується, і цей ефект стає більш вираженим при збільшенні індукції магнітного поля та розміру КТ. Крім того, два піки КП, які спостерігаються у випадку КТ без домішки, об'єднуються в один. Розглядаючи комбінований вплив електричного і магнітного полів на КП в КТ без домішки, то було отримано, що збільшення напруженості електричного поля зміщує піки КП у бік вищих енергій. Магнітне поле посилює поглинання для низькоенергетичних переходів лише при слабкому електричному полі, при цьому загальний КП для низьких енергій стає від'ємним, що пояснюється зміщенням піку нелінійного поглинання в область низьких енергій. Для КТ з домішкою дослідження показали, що наявність домішки в центрі потенціальної ями зменшує висоту як лінійного, так і нелінійного піку поглинання.

Вивчення впливу зовнішніх полів на поляризованість домішки показало, що електричне поле значно змінює її. При зростанні напруженості електричного поля поляризованість швидко збільшується, досягає максимуму, а потім починає знижуватись. У той же час магнітне поле має незначний вплив, лише трохи підвищуючи максимальне значення поляризованості.

Теоретично досліджено вплив електричного та магнітного полів на енергетичні рівні сферичних КТ $CdSe/ZnTe$ та $ZnTe/CdSe$ II типу, використовуючи матричний метод в наближенні ефективної маси для обчислення енергетичних рівнів і ХФ електрона та дірки. Виявлено, що зі збільшенням магнітного поля зростають перекриття ХФ та енергія кулонівської взаємодії між електроном і діркою. Осциляції Ааронова–Бома спостерігаються лише для заборонених переходів, що може пояснити появу додаткових рівнів у спектрі за умов порушеної симетрії. Показано, що під дією магнітного поля сферична симетрія системи руйнується, що призводить до розщеплення енергетичних рівнів за магнітним квантовим числом. Електричне поле, в свою чергу, зміщує енергетичні рівні в низькоенергетичну область спектра, що особливо помітно для

частинок в оболонці. Воно також послаблює кулонівську взаємодію між електроном і діркою, збільшуючи відстань між ними, що призводить до подовження часу життя екситонів.

Таким чином КТ I та II типу показують високу чутливість до електричного та магнітного полів, що дозволяє контролювати їх оптичні властивості, роблячи ці структури перспективними для фотоніки, оптоелектроніки, сенсорів, сонячної енергетики та біомедицини.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Mori N., Ando T. Electron–optical-phonon interaction in single and double heterostructures. *Physical Review B*. 1989. Vol. 40, Iss. 9. P. 6175–6188.
2. Hai G. Q., Peeters F. M., Devreese J. T. Electron optical-phonon coupling in GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum wells due to interface, slab, and half-space modes. *Physical Review B*. 1993. Vol. 48, Iss. 7. P. 4666–4674.
3. Wang X. F., Lei X. L. Polar-optic phonons and high-field electron transport in cylindrical GaAs/AlAs quantum wires. *Physical Review B*. 1994. Vol. 49, Iss. 7. P. 4780–4789.
4. Constantinou N. C., Ridley, B. K. Guided and interface LO phonons in cylindrical GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum wires. *Physical Review B*. 1990. Vol. 41, Iss. 15. P. 10627–10631.
5. Greus Ch., Spiegel R., Knipp P. A., Reinecke T. L., Faller F., Forchel A. Photoluminescence excitation study of lateral-subband structure in barrier-modulated In_{0.09}Ga_{0.91}As quantum wire. *Physical Review B*. 1994. V. 49. P. 5753–5766.
6. Schooss D., Mews A., Eychmüller A., Weller H. Quantum-dot quantum well CdS/HgS/CdS: Theory and experiment. *Physical Review B*. 1994. Vol. 49, Iss. 24. P. 17072–17078.
7. Tkach M., Holovatsky V., Voitsekhivska O. Electron and hole quasistationary states in opened cylindrical quantum wire. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2001. Vol. 11, Iss. 1. P. 17–26.
8. Ткач М. В., Маханець О. М., Гришук А. М. Властивості спектра електронів і дірок у квантовому дроті, що перетинає плоску квантову яму в зовнішньому середовищі. 2005. *Укр. фіз. журн.* Т. 50. С. 1288.
9. Bruchez M., Moronne M., Gin P., Weiss S., Alivisatos A. P. Semiconductor nanocrystals as fluorescent biological labels. *Science*. 1998. Vol. 281. P. 2013–2016.
10. Chan W. C., Nie S. Quantum dot bioconjugates for ultrasensitive nonisotopic detection. *Science*. 1998. Vol. 281. P. 2016–2018.

11. Zhang C. Y., Yeh H. C., Kuroki M. T., Wang T. H. Single-quantum-dot-based DNA nanosensor. *Nat. Mater.* 2005. Vol. 4. P.826-831.
12. Shi L., De Paoli V., Rosenzweig N., Rosenzweig Z. Synthesis and application of quantum dots FRET-based protease sensors. *Journal of the American Chemical Society.* 2006. Vol. 128, Iss. 32. P.10378-10379.
13. Huffaker D. L., Park G., Zou Z., Shchekin O. B., Deppe D. G. (1998). 1.3 μm room-temperature GaAs-based quantum-dot laser. *Applied Physics Letters.* 1998. Vol. 73, Iss. 18. P.2564–2566.
14. Liu G., Zhang S., Xu L., Hu Y., Li X., Zhang S., Zeng H. Recent advances of eco-friendly quantum dots light-emitting diodes for display. *Progress in Quantum Electronics.* 2022. Vol. 86. P. 100415.
15. Jang H. S., Yang H., Kim S. W., Han J. Y., Lee S.-G., Jeon D. Y. White Light-Emitting Diodes with Excellent Color Rendering Based on Organically Capped CdSe Quantum Dots and $\text{Sr}_3\text{SiO}_5\text{: Ce}^{3+}, \text{Li}^+$ Phosphors. *Advanced Materials.* 2008. Vol. 20, Iss. 14. P.2696–2702.
16. Sun Q., Wang Y. A., Li L. S., Wang D., Zhu T., Xu J., Yang C., Li Y. Bright, multicoloured light-emitting diodes based on quantum dots. *Nature Photonics.* 2007. Vol. 1, Iss. 12. P. 717–722.
17. Ashkani O., Sadeq A. Advancements in Biomaterials Development Using Graphene Quantum Dots: A Mini Review. *Significances of Bioengineering & Biosciences.* 2024. Vol. 7, Iss. 1. P. 743-745.
18. Park N.-M., Kim T.-S., Park, S.-J. (2001). Band gap engineering of amorphous silicon quantum dots for light-emitting diodes. *Applied Physics Letters.* 2001. Vol. 78, Iss. 17. P. 2575–2577.
19. Bagalkot V., Zhang L., Levy-Nissenbaum E., Jon S., Kantoff P. W., Langer R., Farokhzad O. C. Quantum dot–aptamer conjugates for synchronous cancer Imaging, therapy, and sensing of drug delivery based on bi-fluorescence resonance energy transfer. *Nano Letters.* 2007. Vol. 7, Iss. 10. P.3065–3070.
20. Vasudevan D., Gaddam R. R., Trinchi A., Cole I. Core–shell quantum dots:

Properties and applications. *Journal of Alloys and Compounds*. 2015. Vol. 636. P. 395–404.

21. Sahu A., Kumar D. Core-shell quantum dots: A review on classification, materials, application, and theoretical modeling. *Journal of Alloys and Compounds*. 2022. Vol. 924. P. 166508.

22. Joglekar P.V., Mandalkar D.J., Nikam M.A., Pande N.S., Dubal A. Review article on Quantum Dots: Synthesis, Properties and Application. *International Journal of Research in Advent Technology*. 2019. Vol. 7, No.1. P. 510–515.

23. Chen Y., Pépin A. Nanofabrication: Conventional and nonconventional methods. *Electrophoresis*. 2001. Vol. 22, No. 2. P. 187–207.

24. Mack C. Fundamental Principles of Optical Lithography: The Science of Microfabrication. Chichester: John Wiley & Sons Ltd, 2008. P. 1–28.

25. Pease R. F., Chou S. Y. Lithography and Other Patterning Techniques for Future Electronics. *Proceedings of the IEEE*. 2008. Vol. 96, No. 2. P.248–270.

26. Suryanarayana C. Mechanical alloying and milling. *Progress in Materials Science*. 2001. Vol. 46. P.1–184.

27. Russo R. E. Laser Ablation. *Applied Spectroscopy*. 1995. Vol. 49, No. 9. P. 14A–28A.

28. Yang G. Laser ablation in liquids: Applications in the synthesis of nanocrystals. *Progress in Materials Science*. 2007. Vol. 52, No. 4. P. 648–698.

29. Franchi S., Trevisi G., Seravalli L., Frigeri P. Quantum dot nanostructures and molecular beam epitaxy. *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials*. 2003. Vol. 47, No. 2-3. P.166–195.

30. Lu X., Koyama M., Izumi Y., Nakata Y., Adachi S., Muto, S. Size Distribution and Scaling Behavior of InAlAs/AlGaAs Quantum Dots Grown on GaAs by Molecular Beam Epitaxy. *Japanese Journal of Applied Physics*. 2013. Vol. 52, No. 2R. P. 025602.

31. Ferreira S. O., Neves B. R. A., Magalhães-Paniago R., Malachias A., Rappl P. H. O., Ueta, A. Y., Abramof E., Andrade M. S. AFM characterization of PbTe quantum dots grown by molecular beam epitaxy under Volmer–Weber mode. *Journal of Crystal*

Growth. 2001. Vol. 231, No. 1-2. P.121–128.

32. Mi Z., Bhattacharya P. Molecular-beam epitaxial growth and characteristics of highly uniform InAs/GaAs quantum dot layers. *Journal of Applied Physics*. 2005. Vol. 98, No. 2. P. 023510.

33. Najjar R., André R., Besombes L., Bougerol C., Mariette H., Tatarenko S. Molecular beam epitaxy growth of ZnTe/ZnSe Type-II quantum dots. *Journal of the Korean Physical Society*. 2008. Vol. 53, No. 1. P.137-140.

34. Murray C. B., Kagan C. R., Bawendi M. G. Synthesis and Characterization of Monodisperse Nanocrystals and Close-Packed Nanocrystal Assemblies. *Annual Review of Materials Science*. 2000. Vol. 30, No. 1. P.545–610.

35. Elghanian R., Storhoff J. J., Mucic R. C., Letsinger R. L., Mirkin C. A. Selective Colorimetric Detection of Polynucleotides Based on the Distance-Dependent Optical Properties of Gold Nanoparticles. *Science*. 1997. Vol. 277, No. 5329. P.1078–1081.

36. Savchuk A. I., Rudko G. Y., Fediv V. I., Voloshchuk A. G., Gule E. G., Ivanchak S. A., Makoviy V. V. Evolution of CdS:Mn nanoparticle properties caused by pH of colloid solution and ultrasound irradiation. *Physica Status Solidi (c)*. 2010. Vol. 7, No. 6. P.1510–1512.

37. Kim J, Roh J, Park M, Lee C. Recent Advances and Challenges of Colloidal Quantum Dot Light-Emitting Diodes for Display Applications. *Adv. Mater.* 2024. Vol. 36, No. 20. P. e2212220.

38. Shu Y., Lin X., Qin H., Hu Z., Jin Y. Peng X. Quantum Dots for Display. *Angewandte Chemie*. 2020. Vol. 59, No. 50. P. 22312-22323.

39. Huang Y.-M., Singh K. J., Liu A.-C., Lin C.-C., Chen Z., Wang K., Lin Y., Liu Z., Wu T., Kuo H.-C. Advances in Quantum-Dot-Based Displays. *Nanomaterials*. 2020. Vol. 10, No. 7. P. 1327.

40. Huang, Y., Hsiang E.-L., Deng M.-Y., Wu S.-T. Mini-LED, Micro-LED and OLED displays: present status and future perspectives. *Light: Science & Applications*. 2020. Vol. 9, No. 105.

41. Emin S., Singh S. P., Han L., Satoh N., Islam A. Colloidal quantum dot solar cells.

Solar Energy. 2011. Vol. 85, No. 6. P. 1264–1282.

42. Kamat, P. V. Quantum Dot Solar Cells. The Next Big Thing in Photovoltaics. *The Journal of Physical Chemistry Letters*. 2013. Vol. 4, No. 6. P. 908–918.

43. Tyagi J., Gupta, H., Purohit L. P. Cascade Structured ZnO/TiO₂/CdS quantum dot sensitized solar cell. *Solid State Sciences*. 2020. Vol. 102. P. 106176.

44. Biju V. Chemical modifications and bioconjugate reactions of nanomaterials for sensing, imaging, drug delivery and therapy. *Chem. Soc. Rev.* 2014. Vol. 43, No. 3. P. 744–764.

45. Le N., Kim K. Current Advances in the Biomedical Applications of Quantum Dots: Promises and Challenges. *International Journal of Molecular Sciences*. 2023. Vol. 24, No. 16. P. 12682.

46. Nazri N. A. A., Azeman N. H., Luo Y., A Bakar A. A. Carbon quantum dots for optical sensor applications: A review. *Optics & Laser Technology*. 2021. Vol. 139. P. 106928.

47. Safari M. Recent Advances in Quantum Dots-Based Biosensors. IntechOpen. 2023. P. 1-19.

48. Ding R., Chen Y., Wang Q., Wu Z., Zhang X., Li B., Lin L. Recent advances in quantum dots-based biosensors for antibiotic detection. *Journal of Pharmaceutical Analysis*. 2021. Vol. 12, Iss. 3. P. 355–364.

49. Kunwar N., Zala H., Parveen K. Quantum Dots. Amsterdam: Elsevier, 2023. P. 313–338.

50. Norman J. C., Jung D., Wan Y., Bowers J. E. Perspective: The future of quantum dot photonic integrated circuits. *APL Photonics*. 2018. Vol. 3, No. 3. P. 030901.

51. Yuan Q., Wang T., Yu P., Zhang H., Zhang H., Ji W. A review on the electroluminescence properties of quantum-dot light-emitting diodes. *Organic Electronics*. 2021. Vol. 90. P. 106086.

52. Si W., Zhou W., Liu X., Wang K., Liao Y., Yan F., Ji X. Recent Advances in Broadband Photodetectors from Infrared to Terahertz. *Micromachines (Basel)*. 2024. Vol. 15, No. 4. P. 427.

53. Kloeffer C., Loss D. Prospects for Spin-Based Quantum Computing in Quantum Dots. *Annual Review of Condensed Matter Physics*. 2013. Vol. 4, No. 1. P. 51–81.
54. Jia-Kui S., Hong-Juan L., Xiao J. Triangular bound potential quantum dot qubit. *Physica B: Condensed Matter*. 2009. Vol. 404, No. 14-15. P. 1961–1964.
55. Watson T. F., Philips S. G. J., Kawakami E., Ward D. R., Scarlino P., Veldhorst M., Savage D. E., Lagally M. G., Friesen M., Coppersmith S. N., Eriksson S. N., Vandersypen L. M. K. A programmable two-qubit quantum processor in silicon. *Nature*. 2018. Vol. 555, No. 7698. P. 633–637.
56. Shilpa G., Kumar P. M., Kumar D. K., Deepthi P.R., Sadhu V., Sukhdev A., Kakarla R. R. Recent advances in the development of high efficiency quantum dot sensitized solar cells (QDSSCs): A review. *Materials Science for Energy Technologies*. 2023. P. 533-546.
57. Di Carlo A. Organic and Inorganic Nanostructures: An Atomistic Point of View. *Physica Status Solidi (b)*. 2002. Vol. 232, No. 1. P. 5–12.
58. Di Carlo A. Semiconductor Nanostructures. *Physica Status Solidi (b)*. 2000. Vol. 217, No. 1. P. 703–722.
59. Porezag D., Frauenheim T., Köhler T., Seifert, G., Kaschner, R. Construction of tight-binding-like potentials on the basis of density-functional theory: Application to carbon. *Physical Review B*. 1995. Vol. 51, No. 19. P. 12947–12957.
60. Wang L.-W., Franceschetti A., Zunger A. Million-atom pseudopotential calculation of γ -X mixing in GaAs/AlAs superlattices and quantum dots. *Physical Review Letters*. 1997. Vol. 78, No. 14. P. 2819–2822.
61. Baskoutas S., Terzis, A. F. Size-dependent band gap of colloidal quantum dots. *Journal of Applied Physics*. 2006. Vol. 99, No. 1. P. 013708.
62. Ciurla M., Adamowski J., Szafran B., Bednarek S. Modelling of confinement potentials in quantum dots. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2002. Vol. 15, No. 4. P. 261–268.
63. Duque C. A., Porras-Montenegro N., Barticevic Z., Pacheco M., Oliveira L. E. Electron-hole transitions in self-assembled InAs/GaAs quantum dots: Effects of applied

magnetic fields and hydrostatic pressure. *Microelectronics Journal*. 2005. Vol. 36, No. 3-6. P. 231–233.

64. Wu S., Wan L. Electronic structures in a CdSe spherical quantum dot in a magnetic field: Diagonalization method and variational method. *Journal of Applied Physics*. 2012. Vol. 111, No. 6. P. 063711.

65. Holovatsky V., Voitsekhivska O., Bernik I. Effect of magnetic field on electron spectrum in spherical nano-structures. *Condens. Matter Phys*. 2014. Vol. 17, No. 1. P. 13702.

66. Al E. B., Kasapoglu E., Sari H., Sökmen I. Zeeman splitting, Zeeman transitions and optical absorption of an electron confined in spherical quantum dots under the magnetic field. *Philosophical Magazine*. 2020. Vol. 101. P.1–12.

67. Çakır B., Yakar Y., Özmen A. Linear and nonlinear absorption coefficients of spherical quantum dot inside external magnetic field. *Physica B: Condensed Matter*. 2017. Vol. 510. P. 86–91.

68. Stevanović L., Filipović N., Pavlović V. Effect of magnetic field on absorption coefficients, refractive index changes and group index of spherical quantum dot with hydrogenic impurity. *Optical Materials*. 2019. Vol. 91. P. 62–69.

69. Holovatsky V. A., Bernik I. B., Yakhnevych M. Y. Effect of magnetic field on energy spectrum and localization of electron in CdS/HgS/CdS/HgS/CdS multilayered spherical nanostructure. *Physica B: Condensed Matter*. 2017. Vol. 508. P. 112–117.

70. Holovatsky V.A., Yakhnevych M.Ya., Voitsekhivska O.M. Optical properties of GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs quantum dot with off-central impurity driven by electric field. *Condensed Matter Physics*. 2018. Vol. 21, No. 1. P. 13703.

71. Lorke A., Johannes Luyken R., Govorov A. O., Kotthaus J. P., Garcia J. M., Petroff P. M. Spectroscopy of Nanoscopic Semiconductor Rings. *Physical Review Letters*. 2000. Vol. 84, No. 10. P. 2223–2226.

72. Makhanets O.M., Gutsul V.I., Tsiupak N.R., Voitsekhivska O.M. Exciton spectrum in multi-shell hexagonal semiconductor nanotube. *Condensed Matter Physics*. 2012. Vol. 15, No. 3. P. 33704.

73. Сеті Ю.О., Бойко І.В., Войцехівська О.М. Спектральні параметри та провідність симетричної чотирибар'єрної резонансно-тунельної структури. *Науковий вісник ЧНУ: Фізика. Електроніка*. 2011. Т. 1, № 2. С. 9-13.
74. Holovatsky V. A., Makhanets O. M., Voitsekhivska O. M. Oscillator strengths of electron quantum transitions in spherical nano-systems with donor impurity in the center. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2009. Vol. 41, No. 8. P. 1522–1526.
75. Yilmaz S., Şafak H. Oscillator strengths for the intersubband transitions in a CdS – SiO₂ quantum dot with hydrogenic impurity. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2007. Vol. 36, No. 1. P. 40–44.
76. M'zerd S., El Haouari M., Aghoutane M., El-Yadri M., Feddi E., Dujardin F., Zorkani I., Jorio A., Sadoqi M., Long G. Electric field effect on the photoionization cross section of a single dopant in a strained AlAs/GaAs spherical core/shell quantum dot. *Journal of Applied Physics*. 2018. Vol. 124, No. 16. P. 164303.
77. Li S., Shi L., Yan Z.-W. Binding energies and photoionization cross-sections of donor impurities in GaN/Al_xGa_{1-x}N spherical quantum dot under hydrostatic pressure. *Modern Physics Letters B*. 2020. Vol. 34, No. 7. P. 2050153.
78. Rath A. K., Bhaumik S., Pal A. J. (2010). Mn-doped nanocrystals in light-emitting diodes: Energy-transfer to obtain electroluminescence from quantum dots. *Applied Physics Letters*. 2010. Vol. 97, No. 11. P.113502.
79. Bastard, G. Hydrogenic impurity states in a quantum well: A simple model. *Physical Review B*. 1981. Vol. 24, No. 8. P. 4714–4722.
80. Yuan J.-H., Liu C. Binding energy of an off-center hydrogenic donor in a spherical quantum dot with strong parabolic confinement. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2008. Vol. 41. no.1. P. 41–44.
81. Bose C., Sarkar C. K. Effect of a parabolic potential on the impurity binding energy in spherical quantum dots. *Physica B: Condensed Matter*. 1998. Vol. 253, No. 3-4. P. 238–241.
82. Bose C. Perturbation calculation of impurity states in spherical quantum dots with

parabolic confinement. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 1999. Vol. 4, No. 3. P. 180–184.

83. Dane C., Akbas H., Minez S., Guleroglu A. Electric field effect in a GaAs/AlAs spherical quantum dot. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2008. Vol. 41, No. 2. P. 278–281.

84. Peter A. J. The effect of hydrostatic pressure on binding energy of impurity states in spherical quantum dots. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2005. Vol. 28, No. 3. P. 225–229.

85. Manaselyan A. K., Kirakosyan A. A. The binding energy of hydrogen-like impurity in quantum dots with convex bottom in magnetic field. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2005. Vol. 28, No. 4. P. 462–470.

86. Baskoutas S., Terzis A. F. Binding energy of hydrogenic impurity states in an inverse parabolic quantum well under electric field. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2008. Vol. 40, No. 5. P. 1367–1370.

87. Corella-Madueño A., Rosas R., Marín J. L., Riera R. Hydrogenic impurities in spherical quantum dots in a magnetic field. *Journal of Applied Physics*. 2001. Vol. 90, No. 5. P. 2333–2337.

88. Boichuk V. I., Bilynskyi I. V., Leshko R. Y., Turyanska L. M. The effect of the polarization charges on the optical properties of a spherical quantum dot with an off-central hydrogenic impurity. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2011. Vol. 44, No. 2. P. 476–482.

89. Mikhail I. F. I., El Sayed S. B. A. Exact and variational calculations of a hydrogenic impurity binding energy in a multilayered spherical quantum dot. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2011. Vol. 43, No. 7. P. 1371–1378.

90. Chafai A., Essaoudi I., Ainane A., Ahuja R. Linear and nonlinear optical properties of donors inside a CdSe/ZnTe core/shell nanodot: Role of size modulation. *Results in Physics*. 2019. Vol. 14. P. 102414.

91. Cristea M., Niculescu E. C. Polarizability of a donor impurity in dielectrically modulated core-shell nanodots. *Physics Letters A*. 2013. Vol. 377, No. 16-17. P. 1221–

1226.

92. Cristea M., Niculescu E. C. Hydrogenic impurity states in CdSe/ZnS and ZnS/CdSe core-shell nanodots with dielectric mismatch. *The European Physical Journal B*. 2012. Vol. 85, No. 6.
93. Şahin M. Photoionization cross section and intersublevel transitions in a one- and two-electron spherical quantum dot with a hydrogenic impurity. *Physical Review B*. 2008. Vol. 77, No. 4.
94. Boz F. K., Nisanci B., Aktas S., Okan S. E. Energy levels of GaAs/Al_xGa_{1-x}As/AlAs spherical quantum dot with an impurity. *Applied Surface Science*. 2016. Vol. 387. P. 76–81.
95. Lin C. Y., Ho Y. K. Photoionization cross sections of hydrogen impurities in spherical quantum dots using the finite-element discrete-variable representation. *Physical Review A*. 2011. Vol. 84, No. 2. P. 023407.
96. Şahin M., Tek F., Erdinç A. The photoionization cross section of a hydrogenic impurity in a multi-layered spherical quantum dot. *Journal of Applied Physics*. 2012. Vol. 111, No. 8. P. 084317.
97. Holovatsky V. A., Voitsekhivska O. M., Yakhnevych M. Y. The effect of magnetic field and donor impurity on electron spectrum in spherical core-shell quantum dot. *Superlattices and Microstructures*. 2018. Vol. 116. P. 9–16.
98. Liu D.-M., Xie W.-F. Binding energy of an off-center D⁻ in a spherical quantum dot. *Commun. Theor. Phys*. 2009. Vol. 51. P. 919–922.
99. Boichuk V.I., Leshko R.Ya., Bilynskiy I.V., Turyanska L.M. Off-central acceptor impurity in a spherical quantum dot. *Condensed Matter Physics*. 2012. Vol. 15, No. 3. P. 33702.
100. Xie W. Photoionization and third-order susceptibility of a neutral donor in ZnS/InP/ZnSe core/shell spherical quantum dots. *Physica B: Condensed Matter*. 2014. Vol. 449. P. 57–60.
101. Zeng Z., Garoufalis C. S., Terzis A. F., Baskoutas S. Linear and nonlinear optical properties of ZnO/ZnS and ZnS/ZnO core shell quantum dots: Effects of shell thickness,

impurity, and dielectric environment. *Journal of Applied Physics*. 2013. Vol. 114, No. 2. P. 023510.

102. Chafai A., Essaoudi I., Ainane A., Dujardin F., Ahuja R. Tuning the binding energy of on-center donor in CdSe/ZnTe core/shell quantum dot by spatial parameters and magnetic field strength. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2017. Vol. 94. P. 96–99.

103. Feddi E., Talbi A., Mora-Ramos M. E., El Haouari M., Dujardin F., Duque C. A. Linear and nonlinear magneto-optical properties of an off-center single dopant in a spherical core/shell quantum dot. *Physica B: Condensed Matter*. 2017. Vol. 524, P. 64–70.

104. Assaid E., Feddi E., Khaidar M., Dujardin F., Stébé B. Electric Field Effect on the Energy of an Off-Centre Donor in Quantum Crystallites. *Physica Scripta*. 2001. Vol. 63. no.4, P. 329–335.

105. Dujardin F., Oukerroum A., Feddi E., Bosch Bailach J., Martínez-Pastor J., Zazi M. Effect of a lateral electric field on an off-center single dopant confined in a thin quantum disk. *Journal of Applied Physics*. 2012. Vol. 111, No. 3. P. 034317.

106. Causil D. A., Beltrán C. L., Villamil P. The energy state of an impurity donor in a type II quantum dot. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2015. Vol. 74. P. 510–514.

107. Bose C., Sarkar C. K. Binding Energy of Impurity States in Spherical GaAs – Ga_{1-x}Al_xAs Quantum Dots. *Physica Status Solidi (b)*. 2000. Vol. 218, No. 2. P. 461–469.

108. Mikhail I. F. I., Ismail I. M. M. Hydrogenic impurity in a quantum dot: Comparison between the variational and strong perturbation methods. *Superlattices and Microstructures*. 2010. Vol. 48, No. 4. P. 388–400.

109. Karabulut İ., Baskoutas S. Linear and nonlinear optical absorption coefficients and refractive index changes in spherical quantum dots: Effects of impurities, electric field, size, and optical intensity. *Journal of Applied Physics*. 2008. Vol. 103, No. 7. P. 073512.

110. Tanhaei M. H., Rezaei G. Hydrogenic impurity, external electric and magnetic fields effects on the nonlinear optical properties of a multi-layer spherical quantum dot.

Superlattices and Microstructures. 2016. Vol. 98. P. 29–36.

111. Boichuk V. I., Bilynskyi I. V., Leshko R. Y., Turyanska L. M. Optical properties of a spherical quantum dot with two ions of hydrogenic impurity. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2013. Vol. 54. P. 281–287.

112. Leshko R., Bilynskyi I., Leshko O., Hols'kyi V. Electron energy spectrum of the spherical GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum dot with several impurities on the surface. *Condensed Matter Physics*. 2023. Vol. 26, No. 2. P. 23704.

113. Wang X., Li H., Chen G. Core-shell nanoparticles for cancer imaging and therapy. *Core-Shell Nanostructures for Drug Delivery and Theranostics*. 2018. P. 143–175.

114. Yan C., Du X., Li J., Ding X., Li Z., Tang Y. Effect of Excitation Wavelength on Optical Performances of Quantum-Dot-Converted Light-Emitting Diode. *Nanomaterials*. 2019. Vol. 9, No. 8. P. 1100.

115. Frasco, M., Chaniotakis N. Semiconductor Quantum Dots in Chemical Sensors and Biosensors. *Sensors*. 2009. Vol. 9, No. 9. P. 7266–7286.

116. Selopal G. S., Zhao H., Wang Z. M., Rosei F. Core/Shell Quantum Dots Solar Cells. *Advanced Functional Materials*. 2020. P. 1908762.

117. Rudko G., Fediv V., Davydenko I., Gule E., Olar O., Kovalchuk A. Synthesis of Capped AIIBVI Nanoparticles for Fluorescent Biomarkers. *Nanoscale Research Letters*. 2016. Vol. 11, No. 1. P. 83.

118. Guo Y., Li J. MoS₂ quantum dots: Synthesis, properties and biological applications. *Materials Science and Engineering: C*. 2019. P. 110511.

119. Chatterjee K., Sarkar S., Jagajjanani Rao K., Paria S. Core/shell nanoparticles in biomedical applications. *Advances in Colloid and Interface Science*. 2014. Vol. 209. P. 8–39.

120. Zhang Z., Liu D., Li D., Huang K., Zhang Y., Shi Z., Xie R., Han M.-Y., Wang Y., Yang, W. Dual Emissive Cu: InP/ZnS/InP/ZnS Nanocrystals: Single-Source “Greener” Emitters with Flexibly Tunable Emission from Visible to Near-Infrared and Their Application in White Light-Emitting Diodes. *Chemistry of Materials*. 2015. Vol. 27, No. 4. P. 1405–1411.

121. Lahon S., Jha P. K., Mohan M. Nonlinear interband and intersubband transitions in quantum dots for multiphoton photodetectors. *Journal of Applied Physics*. 2011. Vol. 109, No. 5. P. 054311.
122. Jiao S., Shen Q., Mora-Seró I., Wang J., Pan Z., Zhao K., Kuga Y., Zhong X., Bisquert J. Band Engineering in Core/Shell ZnTe/CdSe for Photovoltage and Efficiency Enhancement in Exciplex Quantum Dot Sensitized Solar Cells. *ACS Nano*. 2015. Vol. 9, No. 1. P. 908–915.
123. Ghosh Chaudhuri R., Paria S. Core/Shell Nanoparticles: Classes, Properties, Synthesis Mechanisms, Characterization, and Applications. *Chemical Reviews*. 2011. Vol. 11, No. 4. P. 2373–2433.
124. Troccoli M., Belyanin A., Capasso F., Cubukcu E., Sivco D. L., Cho A. Y. Raman injection laser. *Nature*. 2005. Vol. 433, No. 7028. P. 845–848.
125. Ma Y., Zhang Y., Liu M., Han T., Wang Y., Wang X. (2022). Improving the performance of quantum dot sensitized solar cells by employing Zn doped CuInS₂ quantum dots. *Advanced Composites and Hybrid Materials*. 2022. Vol. 5. P. 402-409.
126. Miller D. A. B., Chemla D. S., Damen T. C., Gossard A. C., Wiegmann W., Wood T. H., Burrus C. A. Band-Edge Electroabsorption in Quantum Well Structures: The Quantum-Confined Stark Effect. *Physical Review Letters*. 1984. Vol. 53, No. 22. P. 2173–2176.
127. Pedersen T. G. Stark effect in spherical quantum dots. *Physical Review A*. 2019. Vol. 99, No. 6. P. 063410.
128. Empedocles S. A. Quantum-Confined Stark Effect in Single CdSe Nanocrystallite Quantum Dots. *Science*. 1997. Vol. 278, No. 5346. P. 2114–2117.
129. Zhang L., Lv B., Yang H., Xu R., Wang X., Xiao M., Cui V., Zhang J. Quantum Confined Stark Effect in Ensemble of Phase-Pure CdSe/CdS Quantum Dots. *Nanoscale*. 2019. Vol. 11. P. 12619.
130. Pedersen T. G. Stark effect and polarizability of graphene quantum dots. *Physical Review B*. 2017. Vol. 96, No. 11. P. 115432.
131. Wu S., Xia W. Exciton polarizability and absorption spectra in CdSe/ZnS

nanocrystal quantum dots in electric fields. *Journal of Applied Physics*. 2013. Vol. 114, No. 4. P. 043709.

132. Li D., Zhang J., Zhang Q., Xiong Q. Electric-Field-Dependent Photoconductivity in CdS Nanowires and Nanobelts: Exciton Ionization, Franz–Keldysh, and Stark Effects. *Nano Letters*. 2012. Vol. 12, No. 6. P. 2993–2999.

133. Çakır B., Atav Ü., Yakar Y., Özmen A. Calculation of Zeeman splitting and Zeeman transition energies of spherical quantum dot in uniform magnetic field. *Chemical Physics*. 2016. Vol. 475. P. 61–68.

134. Taylor M. W., Spencer P., Clarke E., Harbord E., Murray R. Resolving Zeeman splitting in quantum dot ensembles. *Applied Physics Letters*. 2013. Vol. 102, No. 17. P. 171909.

135. Rinaldi R., Giugno P. V., Cingolani R., Lipsanen H., Sopanen M., Tulkki J., Ahopelto J. Zeeman Effect in Parabolic Quantum Dots. *Physical Review Letters*. 1996. Vol. 77, No. 2. P. 342–345.

136. Moriyama, S., Fuse T., Suzuki M., Aoyagi Y., Ishibashi K. Importance of electron–electron interactions and Zeeman splitting in single-wall carbon nanotube quantum dots. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2005. Vol. 26, No. 1-4. P. 473–476.

137. Mukhopadhyaya S., Boyacioglu B., Saglam M., Chatterjee A. Quantum size effect on the phonon-induced Zeeman splitting in a GaAs quantum dot with Gaussian and parabolic confining potentials. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2008. Vol. 40, No. 8. P. 2776–2782.

138. El Ghazi H., Jorio A., Zorkani I. Theoretical investigation of stark effect on shallow donor binding energy in InGaN spherical QD-QW. *Physica B: Condensed Matter*. 2013. Vol. 422. P. 47–50.

139. Dane C., Akbas H., Guleroglu A., Minez S., Kasapoğlu K. The hydrostatic pressure and electric field effects on the normalized binding energy of hydrogenic impurity in a GaAs/AlAs spherical quantum dot. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2011. Vol. 44, No. 1. P. 186–189.

140. Xie W. Impurity Effects on Optical Property of a Spherical Quantum Dot in the Presence of an Electric Field. *Physica B: Condensed Matter*. 2010. Vol. 405, P. 3436–3440.
141. Sadeghi E. Electric field and impurity effects on optical property of a three-dimensional quantum dot: a combinational potential scheme. *Superlattice Microst.* 2011. Vol. 50. P. 331–339.
142. Burileanu L. M. Photoionization cross-section of donor impurity in spherical quantum dots under electric and intense laser fields. *Journal of Luminescence*. 2014. Vol. 145. P.684-689.
143. Makhanets M., Gutsul V.I., Kuchak A.I. Electron energy spectrum and oscillator strengths of quantum transitions in double quantum ring nanostructure driven by electric field. *Condensed Matter Physics*. 2018. Vol. 21, No. 4. P. 43704.
144. Zeng Z., Garoufalidis C. S., Baskoutas S., Terzis A. F. Stark effect of donor binding energy in a self-assembled GaAs quantum dot subjected to a tilted electric field. *Physics Letters A*. 2012. Vol. 376, No. 42-43. P. 2712–2716.
145. Cristea M. Simultaneous effects of electric field, shallow donor impurity and Geometric Shape on the Electronic States in Ellipsoidal ZnS/CdSe Core-Shell Quantum Dots. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2018. Vol. 103. P. 300–306.
146. Harutyunyan, V. A. Nanospherical heterolayer in strong electrostatic field. *Applied Nanoscience*. 2012. Vol. 2, No. 3. P. 339–344.
147. Kostić R., Stojanović D. Electric field effect on the nonlinear and linear intersubband absorption spectra in CdTe/ZnTe spherical quantum dot. *Journal of Nanophotonics*. 2012. Vol. 6, No. 1. P.061606.
148. Şahin M., Nizamoglu S., Kavruk A. E., Demir H. V. Self-consistent computation of electronic and optical properties of a single exciton in a spherical quantum dot via matrix diagonalization method. *Journal of Applied Physics*. 2009. Vol. 106, No. 4. P. 043704.
149. Lu L., Xie W., Shu Z. Combined effects of hydrostatic pressure and temperature

on nonlinear properties of an exciton in a spherical quantum dot under the applied electric field. *Physica B: Condensed Matter*. 2011. Vol. 406, No. 19. P. 3735–3740.

150. Baghdasaryan D. A., Hayrapetyan D. B., Harutyunyan V. A. Optical transitions in semiconductor nanospherical core/shell/shell heterostructure in the presence of radial electrostatic field. *Physica B: Condensed Matter*. 2017. Vol. 510. P.33–37.

151. Chafai A., Essaoudi I., Ainane A., Dujardin F., Ahuja R. ZnTe/CdSe type-II core/shell spherical quantum dot under an external electric field. *Materials and Devices*. 2018. Vol. 3, No. 1. P. 0504.

152. Ferrón A., Serra P., Osenda O. Quantum control of a model qubit based on a multi-layered quantum dot. *Journal of Applied Physics*. 2013. Vol. 113, No. 13. P. 134304.

153. Rahmani K., Chrafi Y., M’Zred S., Janati S., Zorkani I., Jorio A., Mmadi A. Polarizability and binding energy of a shallow donor in spherical quantum dot-quantum well (QD-QW). *Journal of Physics: Conference Series*. 2018. Vol. 984. P. 012001.

154. Xiao Z., Zhu J., He F. Magnetic field dependence of the binding energy of a hydrogenic impurity in a spherical quantum dot. *Journal of Applied Physics*. 1996. Vol. 79, No. 12. P. 9181–9187.

155. Peter A. J., Gnanasekar K., Navaneethakrishnan K. Binding energy of impurity states in a parabolic quantum dot in a strong magnetic field. *Physica Status Solidi (b)*. 2005. Vol. 242, No. 12. P. 2480–2488.

156. Vanitha A., Peter A. J. Effects of applied magnetic field on the infrared transitions between hydrogenic states in a corrugated quantum well. *The European Physical Journal B*. 2010. Vol. 73, No. 4. P. 547–553.

157. De Souza G. V. B., Bruno-Alfonso A. Finite-difference calculation of donor energy levels in a spherical quantum dot subject to a magnetic field. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2015. Vol. 66. P. 128–132.

158. Yesilgul U., Ungan F., Kasapoglu E. & Sari H., Sökmen İ. The intersubband transitions and binding energy of shallow donor impurities in different shaped quantum wells under the magnetic field. *Modern Physics Letters B*. 2011. Vol. 25. P. 2451-2459.

159. El Ghazi H., Jorio A., Zorkani I. Magnetic field-dependent of binding energy in

GaN/InGaN/GaN spherical QDQW nanoparticles. *Physica B: Condensed Matter*. 2013. Vol. 427. P. 106–109.

160. Niculescu E. C., Bejan D. Nonlinear optical properties of GaAs pyramidal quantum dots: Effects of elliptically polarized radiation, impurity, and magnetic applied fields. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2015. Vol. 74. P. 51–58.

161. Didi Seddik A., Zorkani I. Optical properties of a magneto-donor in a quantum dot. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2005. Vol. 28, No. 4. P. 339–346.

162. Çakır, B., Yakar, Y., & Özmen, A. Investigation of magnetic field effects on binding energies in spherical quantum dot with finite confinement potential. *Chemical Physics Letters*. 2017. Vol. 684. P. 250–256.

163. Al E. B., Kasapoglu E., Sakiroglu S., Sari H., Sökmen I., Duque C. A. Binding energies and optical absorption of donor impurities in spherical quantum dot under applied magnetic field. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2020. Vol. 119. P. 114011.

164. Al E. B., Kasapoglu E., Sari H., Sökmen I. Optical properties of spherical quantum dot in the presence of donor impurity under the magnetic field. *Physica B: Condensed Matter*. 2021. Vol. 613. P. 412874.

165. Niculescu E. C., Stan C., Cristea M., Truscă C. Magnetic-field dependence of the impurity states in a dome-shaped quantum dot. *Chemical Physics*. 2017. Vol. 493. P. 32–41.

166. Rahimi F., Ghaffary T., Naimi Y., Khajehazad H. Effect of magnetic field on energy states and optical properties of quantum dots and quantum antidots. *Optical and Quantum Electronics*. 2021. Vol. 53, No. 1. P. 47.

167. Stevanović L., Filipović N., Pavlović V. Optical properties of spherical quantum dot with on-center hydrogen impurity in magnetic field. *Optical and Quantum Electronics*. 2016. Vol. 48. P. 231.

168. Ji H., Dhomkar S., Wu R., Ludwig J., Lu Z., Smirnov D., Tamargo M. C., Bryant G. W., Kuskovsky I. L. Long spin-flip time and large Zeeman splitting of holes in type-

- II ZnTe/ZnSe submonolayer quantum dots. *J. Appl. Phys.* 2018. Vol. 124. P. 144306.
169. Wu S., Cheng L. Exciton diamagnetic shift and optical properties in CdSe nanocrystal quantum dots in magnetic fields. *Physica B: Condensed Matter*. 2018. Vol. 534. P. 98–104.
170. Heyn C., Duque C. A. Donor impurity related optical and electronic properties of cylindrical $GaAs - Al_xGa_{1-x}As$ quantum dots under tilted electric and magnetic fields. *Scientific Reports*. 2020. Vol. 10. P. 9155.
171. Osorio J.A., Caicedo-Paredes D., Vinasco J., Morales A. L., Radu A., Restrepo R. L., Martínez-Orozco J. C., Tiutiunnyk A., Laroze D., Hieu Nguyen N., Phuc Huynh V., Mora-Ramos M. E., Duque C. A. Pyramidal core-shell quantum dot under applied electric and magnetic fields. *Scientific Reports*. Vol. 10, No. 1. P. 8961.
172. Aharonov Y., Bohm D. Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory. *Physical Review*. 1959. Vol. 115, No. 3. P. 485–491.
173. Bayer M., Korkusinski M., Hawrylak P., Gutbrod T., Michel M., Forchel A. Optical Detection of the Aharonov-Bohm Effect on a Charged Particle in a Nanoscale Quantum Ring. *Physical Review Letters*. 2003. Vol. 90, No. 18. P. 186801.
174. Schweidenback L., Ali T., Russ A. H., Murphy J. R., Cartwright A. N., Petrou A., Li C. H., Yakes M. K., Kioseoglou V., Jonker B. T., Govorov A. Optical Aharonov-Bohm oscillations in InGaAs quantum wells. *Physical Review B*. 2012. Vol. 85, No. 24. P. 245310.
175. Al E. B., Urgan F., Yesilgul U., Kasapoglu E., Sari H., Sökmen I. Effects of applied electric and magnetic fields on the nonlinear optical properties of asymmetric GaAs/Ga_{1-x}Al_xAsGa double inverse parabolic quantum well. *Optical Materials*. 2015. Vol. 47, P.1–6.
176. Kasapoglu E., Urgan F., Duque C. A., Yesilgul U., Mora-Ramos M. E., Sari H., Sökmen I. The effects of the electric and magnetic fields on the nonlinear optical properties in the step-like asymmetric quantum well. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2014. Vol. 61. P. 107–110.
177. Urgan F., Yesilgul U., Kasapoglu E., Sari H., Sökmen I. Effects of applied

- electromagnetic fields on the linear and nonlinear optical properties in an inverse parabolic quantum well. *Journal of Luminescence*. 2012. Vol. 132, No. 7. P. 1627–1631.
178. Sahoo S., Lin Y. C., Ho Y. K. Quantum-confined hydrogenic impurity in a spherical quantum dot under the influence of parallel electric and magnetic fields. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2008. Vol. 40, No. 10. P. 3107–3114.
179. Bilekkaya A., Aktaş Ş., Okan S. E., Boz F. K. Electric and magnetic field effects on the binding energy of a hydrogenic impurity in quantum well wires with different shapes. *Superlattices and Microstructures*. 2008. Vol. 44, No. 1. P. 96–105.
180. Niculescu E., Tiriba G., Spandonide A. Optical absorption in pyramid-shaped quantum dots under applied electric and magnetic fields. *UPB Scientific Bulletin, Series A: Applied Mathematics and Physics*. 2015. Vol. 77. P. 229–240.
181. Karimi M. J., Rezaei G. Effects of external electric and magnetic fields on the linear and nonlinear intersubband optical properties of finite semi-parabolic quantum dots. *Physica B: Condensed Matter*. 2011. Vol. 406, No. 23. P. 4423–4428.
182. Barseghyan M. G., Kirakosyan A. A., Duque C. A. Donor-impurity related binding energy and photoinization cross-section in quantum dots: electric and magnetic fields and hydrostatic pressure effects. *The European Physical Journal B*. 2009. Vol. 72, No. 4. P. 521–529.
183. Li B., Guo K.-X., Liu Z.-L., Zheng Y.-B. Nonlinear optical rectification in parabolic quantum dots in the presence of electric and magnetic fields. *Physics Letters A*. 2008. Vol. 372, No. 8. P. 1337–1340.
184. Zhang Z.-H., Guo K.-X., Chen B., Wang R.-Z., Kang M.-W., Shao S. Theoretical studies on the optical absorption coefficients and refractive index changes in parabolic quantum dots in the presence of electric and magnetic fields. *Superlattices and Microstructures*. 2010. Vol. 47, No. 2. P. 325–334.
185. Boda A. Intersubband optical absorption in Gaussian GaAs quantum dot in the presence of magnetic, electrical and AB flux fields. *Physica B: Condensed Matter*. 2019. Vol. 575. P. 411699.
186. Karabulut İ., Mora-Ramos M. E., Duque C. A. Nonlinear optical rectification and

optical absorption in GaAs – Al_xGa_{1-x}As asymmetric double quantum wells: Combined effects of applied electric and magnetic fields and hydrostatic pressure. *Journal of Luminescence*. 2011. Vol. 131, No. 7. P. 1502–1509.

187. Головацький В., Яхневич М., Чубрей М. Вплив магнітного поля та нецентральної домішки на енергетичний спектр електрона в сферичній багат шаровій наносистемі. *Журнал нано- та електронної фізики*. 2019. Т. 11, № 1. С. 01007:1-5.

188. Головацький В., Чубрей М. Вплив електричного поля на електронні стани, енергію зв'язку та поперечний переріз фотоіонізації воднеподібної домішки в багат шарових квантових точках. *Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології* (НАНСИС-2019): Тези VI Наук. конф. (Київ, 4–6 грудня 2019 р.) / редкол.: А. Г. Наумовець [та ін.]. Київ, 2019. С.29.

189. Головацький В., Чубрей М. Вплив електричного поля на електронні стани, енергію зв'язку та поперечний переріз фотоіонізації воднеподібної домішки в багат шарових квантових точках. *Релаксаційні, нелінійні, акустооптичні процеси і матеріали* : матер. X Міжнар. наук. конф. (Луцьк–Світязь, 25–29 черв. 2020 р.). Луцьк : Вежа-Друк, 2020. С.98-99.

190. Holovatsky V., Chubrey M., Voitsekhivska O. Effect of electric field on photoionisation cross-section of impurity in multilayered quantum dot. *Superlattices and Microstructures*. 2020. Vol. 145. P. 106642.

191. Chubrei M. V., Holovatsky V. A., Duque C. A. Effect of magnetic field on donor impurity-related photoionisation cross-section in multilayered quantum dot. *Philosophical Magazine*. 2021. Vol. 145, No. 24. P. 2614–2633.

192. Holovatsky V. A., Chubrei M. V., Yurchenko O. M. Impurity photoionization cross-section and intersubband optical absorption coefficient in multilayer spherical quantum qots. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2021. Vol. 22, No. 4. P. 630–637.

193. Holovatsky V., Holovatska N., Chubrei M. Optical absorption, photoionization and binding energy of shallow donor impurity in spherical multilayered quantum dot. *Proceedings of SPIE. Fifteenth International Conference on Correlation Optics*. 2021.

Vol. 12126. P. 1212603.

194. Feddi E., El-Yadri M., Dujardin F., Restrepo R. L., Duque C. A. Photoionization cross section and binding energy of single dopant in hollow cylindrical core/shell quantum dot. *Journal of Applied Physics*. 2017. Vol. 121, No. 6. P. 064303.
195. Baydin A., Makihara T., Peraca N. M., Kono, J. Time-domain terahertz spectroscopy in high magnetic fields. *Frontiers of Optoelectronics*. 2020. Vol. 14, No. 1. P. 110–129.
196. Holovatsky V. A., Voitsekhivska O. M., Yakhnevych M. Y. Effect of magnetic field on an electronic structure and intraband quantum transitions in multishell quantum dots. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2017. Vol. 93. P. 295–300.
197. Vinasco Suarez J. A., Radu A., Duque Echeverri C. A. Propiedades electrónicas de un anillo cuántico elíptico con sección transversal rectangular. *Revista EIA*. 2019. Vol. 16, No. 31. Vol. 77. P. 77–87.
198. Vinasco J. A., Radu A., Kasapoglu E., Restrepo R. L., Morales A. L., Feddi E., Mora-Ramos M. E., Duque, C. A. Effects of Geometry on the Electronic Properties of Semiconductor Elliptical Quantum Rings. *Scientific Reports*. 2018. Vol. 8, No. 1. P. 13299.
199. Vinasco J. A., Radu A., Niculescu E., Mora-Ramos M. E., Feddi E., Tulupenko, V., Restrepo R. L., Kasapoglu E., Morales A. L., Duque C. A. Electronic states in GaAs-(Al,Ga) As eccentric quantum rings under nonresonant intense laser and magnetic fields. *Scientific Reports*. 2019. Vol. 9. P. 1427.
200. Vinasco J. A., Radu A., Restrepo R. L., Morales A. L., Mora-Ramos M. E., Duque C. A. Magnetic field effects on intraband transitions in elliptically polarized laser-dressed quantum rings. *Optical Materials*. 2019. Vol. 91. P. 309–320.
201. Boz F. K., Aktas S., Bilekkaya A., Okan S. E. The multilayered spherical quantum dot under a magnetic field. *Applied Surface Science*. 2010. Vol. 256, No. 12. P. 3832–3836.
202. Holovatsky V., Chubrei M., Ivanko, V. Optical Absorption in Core-Shell Quantum

Antidot with Donor Impurity under Applied Magnetic Field. *Proceedings of the 2021 IEEE 11th International Conference "Nanomaterials: Applications and Properties"* (NAP 2021). 2021. P. IDNUM:1-5.

203. Головацький В., Чубрей М. Лінійний та нелінійний коефіцієнти поглинання електромагнітних хвиль в наноструктурах з домішкою під впливом магнітного поля. *Актуальні проблеми фундаментальних наук* : матеріали IV Міжнар. наук. конф. (Луцьк – Світязь, 01 – 05 черв. 2021 р.). Луцьк: Вежа - Друк, 2021. С.152-153.

204. Holovatsky V. A., Chubrei M. V. Optical absorption in core-shell quantum antidot under applied co-directed electric and magnetic fields. *International research and practice conference «Nanotechnology and nanomaterials» (NANO-2021)*. Abstract Book of participants of the International research and practice conference (Lviv, 25 – 27 August 2021) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC «Computer-publishing, information center», 2021. P. 430.

205. Chubrei M. V., Holovatsky V. A., Holovatska N. H. Optical absorption in core-shell quantum antidot with donor impurity under applied co-directed electric and magnetic fields. *The International research and practice conference “Nanotechnology and nanomaterials” (NANO-2022)*. Abstract Book of participants of the International research and practice conference (Lviv, 25–27 August 2022) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC APF POLYGRAPH SERVICE, 2022. P. 453.

206. Holovatsky V. A., Chubrei M. V. Optical absorption in core-shell quantum antidot under applied co-directed electric and magnetic fields. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 2022. Vol. 751, No. 1. P. 149–157.

207. Chubrei M. V., Holovatsky V. A., Holovatska N. H. Optical absorption in core-shell quantum antidot with donor impurity under applied co-directed electric and magnetic fields. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 2024. Vol. 768, No. 3. P. 40–49.

208. Holovatsky V., Holovatskyi I., Chubrei M., Duque C. A. Theoretical modeling of magnetic field effects on the optical properties of type-II core-shell quantum dot. *Applied Nanoscience*. 2023. Vol. 13, No. 11. P. 7125–7133.

209. Головацький В., Чубрей М., Гончарук С. Г. Вплив магнітного поля на оптичні властивості квантової точки II типу ZnTe/CdSe. *Релаксаційні, нелінійні, акустооптичні процеси і матеріали* : матер. XI Міжнар. наук. Конф (Луцьк, 1–5 черв. 2022 р.). Луцьк : Вежа-Друк, 2022. С.43.
210. Holovatsky V. A., Chubrei M. V., Duque C. A. Core-shell type-II spherical quantum dot under externally applied electric field. *Thin Solid Films*. 2022. Vol. 747. P. 139142.
211. Tkach N.V., Holovatsky V.A., Voitsekhivska O.N. On the spectra of electrons and holes in an open spherical nanoheterostructure (through the example of GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs. *Semiconductors*. 2000. Vol. 34. P. 602–606.
212. Kaniyankandy S., Rawalekar S., Verma S., Ghosh H. N. Ultrafast Hole Transfer in CdSe/ZnTe Type II Core–Shell Nanostructure. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2010. Vol. 115, No. 5. P. 1428–1435.
213. Koç F., Sahin M. The electronic and optical properties of an exciton, biexciton and charged excitons in CdSe/CdTe-based multi-shell type-II quantum dot nanocrystals. *Appl. Phys. A*. 2019. Vol. 125. P. 705.
214. Kavruk A. E. A detailed investigation of electronic and optical properties of single exciton in GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_yGa_{1-y}As multi-shell quantum dot. *Philosophical Magazine*. 2018. Vol. 98, No. 34. P. 3109–3125.
215. Califano M., Franceschetti A., Zunger A. Lifetime and polarization of the radiative decay of excitons, biexcitons, and trions in CdSe nanocrystal quantum dots. *Physical Review B*. 2007. Vol. 75, No. 11. P. 115401.
216. Alén B., Bosch J., Granados D., Martínez-Pastor J., García J. M., González L. Oscillator strength reduction induced by external electric fields in self-assembled quantum dots and rings. *Physical Review B*. 2007. Vol. 75, No. 4. P. 045319.
217. Chafai A., Dujardin F., Essaoudi I., Ainane A. Energy spectrum of an exciton in a CdSe/ZnTe type-II core/shell spherical quantum dot. *Superlattices and Microstructures*. 2017. Vol. 101. P. 40–48.
218. Şahin M., Nizamoglu S., Kavruk A. E., Demir H. V. Self-consistent computation

of electronic and optical properties of a single exciton in a spherical quantum dot via matrix diagonalization method. *Journal of Applied Physics*. 2009. Vol. 106, No. 4. P. 043704.

219. Cheche T. O., Barna V., Chang Y.-C. Analytical approach for type-II semiconductor spherical core-shell quantum dots heterostructures with wide band gaps. *Superlattices and Microstructures*. 2013. Vol. 60. P. 475–486.

ДОДАТОК

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові статті, опубліковані у виданнях, що входять до списку наукових фахових видань України та проіндексованих у наукометричних базах даних Web of Science Core Collection та/або Scopus

1. Головацький В., Яхневич М., Чубрей М. Вплив магнітного поля та нецентральної домішки на енергетичний спектр електрона в сферичній багат шаровій наносистемі. *Журнал нано- та електронної фізики*. 2019. Т. 11, № 1. С. 01007:1-5. (Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки енергетичного спектра та хвильової функції електрона).
2. Holovatsky V. A., Chubrei M. V., Yurchenko O. M. Impurity photoionization cross-section and intersubband optical absorption coefficient in multilayer spherical quantum qots. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2021. Vol. 22, No. 4. P. 630–637. (Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки енергетичного спектра та хвильової функції електрона).

Наукові статті, опубліковані у періодичних наукових виданнях, проіндексованих у наукометричних базах даних Web of Science Core Collection та/або Scopus

3. Holovatsky V., Chubrey M., Voitsekhivska O. Effect of electric field on photoionisation cross-section of impurity in multilayered quantum dot. *Superlattices and Microstructures*. 2020. Vol. 145. P. 106642. (Особистий внесок автора: розраховано енергетичний спектр та хвильові функції електрона, енергію зв'язку електрона з домішкою, переріз фотоіонізації домішки та здійснено аналіз отриманих результатів).
4. Holovatsky V., Holovatska N., Chubrei M. Optical absorption, photoionization and binding energy of shallow donor impurity in spherical multilayered quantum dot. *Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering. Fifteenth*

International Conference on Correlation Optics. 2021. Vol. 12126. P. 1212603. (Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки енергетичного спектра та хвильової функції електрона).

5. Chubrei M. V., Holovatsky V. A., Duque, C. A. Effect of magnetic field on donor impurity-related photoionisation cross-section in multilayered quantum dot. *Philosophical Magazine*. 2021. Vol. 145, No. 24. P. 2614–2633. (Особистий внесок автора: розраховано енергетичний спектр електрона, енергію електрон-домішкових переходів, переріз фотіонізації домішки та проаналізовано отримані результати).

6. Holovatsky V. A., Chubrei M. V., Duque C. A. Core-shell type-II spherical quantum dot under externally applied electric field. *Thin Solid Films*. 2022. Vol. 747. P. 139142. (Особистий внесок автора: частково виконано аналітичні та чисельні розрахунки, проаналізовано отримані результати).

7. Holovatsky V. A., Chubrei M. V. Optical absorption in core-shell quantum antidot under applied co-directed electric and magnetic fields. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 2022. Vol. 751, No. 1. P. 149–157. (Особистий внесок автора: виконано комп'ютерні розрахунки енергетичного спектра електрона, сили осцилятора та коефіцієнтів поглинання).

8. Holovatsky V., Holovatskyi I., Chubrei M., Duque C. A. Theoretical modeling of magnetic field effects on the optical properties of type-II core-shell quantum dot. *Applied Nanoscience*. 2023. Vol. 13. No. 11. P. 7125–7133. (Особистий внесок автора: частково виконано аналітичні та чисельні розрахунки, проаналізовано отримані результати).

9. Chubrei M. V., Holovatsky V. A., Holovatska N. H. Optical absorption in core-shell quantum antidot with donor impurity under applied co-directed electric and magnetic fields. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 2024. Vol. 768, No. 3. P. 40–49. (Особистий внесок автора: виконано комп'ютерні розрахунки енергетичного спектра електрона, енергії зв'язку електрона з домішкою, коефіцієнтів поглинання та поляризованості домішки).

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації

10. Головацький В., Чубрей М. Вплив електричного поля на електронні стани, енергію зв'язку та поперечний переріз фотоіонізації воднеподібної домішки в багаточарових квантових точках. *Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології* (НАНСИС-2019): Тези VI Наук. конф. (Київ, 4–6 грудня 2019 р.) / редкол.: А. Г. Наумовець [та ін.]. Київ, 2019. С.29. *(Особистий внесок автора: побудовано та проаналізовано залежності енергії зв'язку, середньої відстані між електроном та іоном домішки від напруженості електричного поля та положення домішки).*
11. Головацький В., Чубрей М. Вплив електричного поля на електронні стани, енергію зв'язку та поперечний переріз фотоіонізації воднеподібної домішки в багаточарових квантових точках. *Релаксаційні, нелінійні, акустооптичні процеси і матеріали* : матер. X Міжнар. наук. конф. (Луцьк–Світязь, 25–29 черв. 2020 р.). Луцьк : Вежа-Друк, 2020. С.98-99. *(Особистий внесок автора: побудовано та проаналізовано залежності поперечного перерізу фотоіонізації від величини та напрямку електричного поля).*
12. Головацький В., Чубрей М. Лінійний та нелінійний коефіцієнти поглинання електромагнітних хвиль в наноструктурах з домішкою під впливом магнітного поля. *Актуальні проблеми фундаментальних наук* : матеріали IV Міжнар. наук. конф. (Луцьк – Світязь, 01 – 05 черв. 2021 р.). Луцьк: Вежа - Друк, 2021. С.152-153. *(Особистий внесок автора: побудовано та проаналізовано коефіцієнта поглинання від енергії падаючого фотона).*
13. Holovatsky V. A., Chubrei M. V. Optical absorption in core-shell quantum antidot under applied co-directed electric and magnetic fields. *International research and practice conference «Nanotechnology and nanomaterials» (NANO-2021)*. Abstract Book of participants of the International research and practice conference (Lviv, 25 – 27 August 2021) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC «Computer-publishing, information center», 2021. P. 430. *(Особистий внесок автора: описано теоретичну частину для отримання коефіцієнтів поглинання).*

14. Holovatsky V., Chubrei M., Ivanko, V. Optical Absorption in Core-Shell Quantum Antidot with Donor Impurity under Applied Magnetic Field. *Proceedings of the 2021 IEEE 11th International Conference on “Nanomaterials: Applications and Properties”* (NAP-2021). 2021. P. IDNUM:1-5. *(Особистий внесок автора: виконано комп'ютерні розрахунки енергетичного спектра електрона, енергій переходів та коефіцієнтів поглинання).*
15. Chubrei M. V., Holovatsky V. A., Holovatska N. H. Optical absorption in core-shell quantum antidot with donor impurity under applied co-directed electric and magnetic fields. *The International research and practice conference “Nanotechnology and nanomaterials” (NANO-2022)*. Abstract Book of participants of the International research and practice conference (Lviv, 25–27 August 2022) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC APF POLYGRAPH SERVICE, 2022. P. 453. *(Особистий внесок автора: виконано комп'ютерні розрахунки енергетичного спектра електрона, енергій зв'язку електрона з домішкою та коефіцієнтів поглинання).*
16. Головацький В., Чубрей М., Гончарук С. Г. Вплив магнітного поля на оптичні властивості квантової точки II типу ZnTe/CdSe. *Релаксаційні, нелінійні, акустооптичні процеси і матеріали* : матер. XI Міжнар. наук. Конф (Луцьк, 1–5 черв. 2022 р.). Луцьк : Вежа-Друк, 2022. С.43. *(Особистий внесок автора: виконано комп'ютерні розрахунки енергетичного спектра електрона).*

ВІДОМОСТІ ПРО АПРОБАЦІЮ МАТЕРІАЛІВ ДИСЕРТАЦІЇ

1. VI Наукова конференція «Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології» (НАНСИС-2019), м. Київ, 4–6 грудня 2019р.
2. X Міжнародна наукова конференція «Релаксаційні, нелінійні, акустооптичні процеси і матеріали» (РНАОПМ-2020), м. Луцьк–Світязь, 25–29 червня 2020р. (онлайн)
3. IV Міжнародна наукова конференція «Актуальні проблеми фундаментальних наук», м. Луцьк–Світязь, 01 – 05 червня 2021р. (онлайн)

4. 9th International Conference «Nanotechnologies and Nanomaterials» (NANO–2021), м. Львів, 25–27 серпня 2021р. (онлайн)
5. 11th International Conference on «Nanomaterials: Applications and Properties» (NAP-2021), м. Одеса, 5-11 вересня 2021р.
6. 10th International research and practice conference «Nanotechnology and Nanomaterials» (NANO–2022), м. Львів, 25–27 серпня 2022р. (онлайн)
7. XI Міжнародна наукова конференція «Релаксаційні, нелінійні, акустооптичні процеси і матеріали» (РНАОПМ-2022), м. Луцьк, 1-5 червня 2022р. (онлайн)