

В.А. Головацький¹, М.В. Чубрей¹, О.М. Юрченко²

Переріз фотоіонізації домішки та коефіцієнт міжпідзонного поглинання світла в багатошарових сферичних квантових точках

¹Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, Чернівці, Україна, v.holovatsky@chnu.edu.ua

²Волинський національний університет імені Лесі Українки, Луцьк, Україна, yurchenko.oksana@vnu.edu.ua

У рамках наближення ефективної маси досліджено енергетичний спектр, хвильові функції та енергії зв'язку електрона з іоном донорної домішки, розміщеним в центрі багатошарової сферичної квантової точки (БСКТ), що складається з ядра (GaAs) та двох сферичних оболонок ($Al_xGa_{1-x}As$ та GaAs). На основі точних хвильових функцій електрона, які виражаються через кулонівські функції першого та другого роду, розраховано спектральні залежності перерізу фотоіонізації домішки (ПФД) та коефіцієнта міжпідзонного поглинання (КМП) за різних геометричних розмірів наноструктури.

Показано, що внаслідок зменшення ширини зовнішньої потенціальної ями змінюється локалізація електрона в наносистемі, що суттєво впливає на енергію зв'язку електрона з домішкою, переріз фотоіонізації та коефіцієнт міжпідзонного поглинання. Положення піка ПФД, пов'язаного з квантовим переходом електрона з основного стану в стан $1p^0$, зміщується в область вищих енергій і зменшується його висота. Водночас зростає висота піків ПФД, що пов'язані з квантовими переходами у більш збуджені стани ($2p^0$, $3p^0$).

Наявність домішки та зміна розмірів БСКТ суттєво впливає на коефіцієнт міжпідзонного поглинання. Зменшення ширини зовнішньої потенціальної ями БСКТ у відсутності домішки приводить до монотонного збільшення КМП через перший збуджений стан, а у випадку наявності центральної домішки зростає поглинання через стани з більшими енергіями.

Отримані результати дають можливість передбачити особливості впливу магнітного поля на оптичні властивості БСКТ з двома потенціальними ямами.

Ключові слова: багатошарова квантова точка, донорна домішка, переріз фотоіонізації домішки, енергія зв'язку домішки, оптичний коефіцієнт поглинання.

Подано до редакції 25.08.2021; прийнято до друку 05.10.2021.

Вступ

Багатошарові сферичні квантові точки (БСКТ), які складаються з ядра і декількох оболонок напівпровідникових матеріалів з різними величинами ширини забороненої зони інтенсивно досліджуються через перспективи їх використання в різноманітних пристроях наноелектроніки та нанофотоніки. Вони дозволяють значно покращити вже існуючі та створити принципово нові напівпровідникові прилади: джерела випромінювання білого світла, високоефективні фотоелектричні прилади,

флуоресцентні мітки з багатомодовим випромінюванням, різноманітні детектори, магнітооптичні прилади та елементи пам'яті для новітніх комп'ютерів [1-5].

Добре відомо, що за допомогою домішок, зовнішніх електричного та магнітного полів можна керувати оптичними властивостями напівпровідникових систем. Для створення магнітно-та електрооптичних напівпровідникових приладів необхідні теоретичні дослідження оптичних властивостей БСКТ, впливу домішок та зовнішніх полів на їх енергетичний спектр, локалізацію носіїв

заряду в складному потенціалі розмірного квантування.

Більшість таких досліджень ґрунтується на розв'язках одночастинкового рівняння Шредінгера в наближенні ефективної маси. При цьому, для знаходження енергій декількох найнижчих станів часто використовують різні варіаційні методи чи метод теорії збурень [6-16], метод плавної зміни потенціалу (potential morphing method) [17-19] або прями числові методи розв'язу диференціального рівняння [20-23]. Лише для деяких задач вдається знайти точні розв'язки рівняння Шредінгера, які особливо цінні, оскільки на їх основі можна розраховувати весь енергетичний спектр та розв'язувати складніші задачі. Наприклад, точні хвильові функції електрона в БСКТ з прямокутними потенціальними ямами та бар'єрами виражаються через функції Беселя і утворюють ортонормований базис функцій. На основі такого ортонормованого базису матричним методом досліджено вплив заряджених домішок та зовнішніх полів на оптичні властивості БСКТ [24-32]. Крім цього, отримані коефіцієнти розкладу хвильових функцій квазічастинки дозволяють оцінити вклад станів незбуреної системи у формування нових станів квазічастинки.

Розрахунок енергетичного спектру та хвильових функцій (ХФ) електрона в сферичних наносистемах з домішкою матричним методом потребує врахування великої кількості доданків через наявність сингулярного потенціалу. Діагоналізація таких матриць нашоухується на технічні проблеми стабільності розв'язку.

Для випадку центральної домішки ця проблема вирішується використанням точних розв'язків рівняння Шредінгера на основі функцій Матьє, Вітейкера, вироджених гіпергеометричних чи кулонівських хвильових функцій [33-37]. Їх числовий розрахунок складніший ніж функцій Беселя, але у разі використання ортонормованого базису на кулонівських ХФ зменшується розмір матриці, необхідної для діагоналізації, при дослідженні впливу електричного чи магнітного поля на домішкові стани в БСКТ. Отже, такий ортонормований базис є добрим та надійним інструментом для наступних теоретичних досліджень.

В роботі [38] автори використовували подібний ортонормований базис ХФ для дослідження впливу магнітного поля на оптичні властивості сферичних наносистем типу ядро/оболонка (БСКТ з однією потенціальною ямою). В роботах [37, 39] продемонстровано можливість використання точних розв'язків рівняння Шредінгера на основі вироджених гіпергеометричних функцій для дослідження енергій зв'язку електрона з домішкою та сили осцилятора квантових переходів квазічастинок у БСКТ, що складається з двох потенціальних ям, розділених потенціальним бар'єром. Показано, що розрахована енергія зв'язку добре узгоджується з результатами інших методів, а дипольний момент квантових переходів сильно залежить від співвідношення розмірів потенціальних ям БСКТ,

оскільки при цьому змінюється розподіл електронної густини у наносистемі.

Дослідження двохямних та трьохямних БСКТ [30, 40] показують, що сильне постійне магнітне поле зменшує ефективну ширину зовнішньої потенціальної ями, що приводить до змін в локалізації електрона в основному та збуджених станах, і таким чином впливає на дипольний момент та сили осцилятора квантових переходів.

Для збільшення чутливості оптичних властивостей наносистеми до магнітного поля необхідно підібрати такі розміри ядра та оболонки БСКТ, щоб електрон в основному стані був локалізований у зовнішній ямі і невеликим зменшенням її розміру переходив у внутрішню [41]. Аналогічно можна підібрати розміри БСКТ для збільшення чутливості її оптичних характеристик до електричного поля [29].

Переріз фотоіонізації домішки та коефіцієнт міжпідзонного поглинання світла - це ті оптичні характеристики, які інтенсивно досліджувались в багатьох роботах для простих сферичних та циліндричних КТ та БСКТ з різним профілем потенціалу розмірного квантування [10-14, 16-19, 32]. Матричним методом з використанням ортонормованого базису на функціях Беселя досліджено вплив електричного [32] та магнітного поля [42] на ПФД центральної та нецентральної донорної домішки в сферичному шарі, що утворює потенціальну яму скінченної глибини. В цих роботах показано необхідність врахування квантових переходів у вищі збуджені стани, оскільки їх вклад зростає зі збільшенням зовнішнього збурення. Подібні дослідження для двохямних БСКТ наразі не виконувались, хоча їх чутливість до зовнішніх полів повинна бути більшою.

У даній роботі виконується дослідження впливу розміру зовнішньої потенціальної ями БСКТ GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs з центральною донорною домішкою на енергетичний спектр, хвильові функції, енергію зв'язку, переріз фотоіонізації домішки та коефіцієнт міжпідзонного поглинання світла.

I. Теорія

Багатошарова сферична квантова точка, що досліджується в даній роботі, складається з сферичного ядра (GaAs) та двох сферичних шарів (Al_xGa_{1-x}As та GaAs), поміщена у середовище з великою забороненою зоною. Ядро та зовнішній сферичний шар БСКТ утворюють потенціальні ями для електрона, а внутрішній шар - потенціальний бар'єр, висота якого V визначається процентним вмістом в ньому алюмінію - x . Радіус ядра - r_0 , товщини сферичних шарів - Δ_1 та Δ_2 . Донорна домішка розміщується в центрі ядра наносистеми. Схема потенціальної енергії електрона в БСКТ наведена на рис. 1. Рівняння Шредінгера для електрона має вигляд:

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

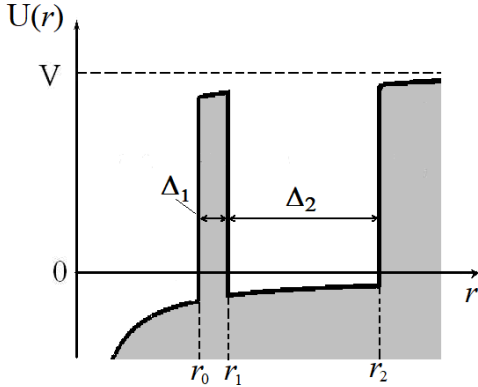


Рис. 1. Схема потенціальної анергії електрона в БСКТ GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs при Z = 1.

де координатна залежність ефективної маси, діелектричної проникності та потенціальної енергії визначається наступними виразами:

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

$$\varepsilon(r) = \begin{cases} \varepsilon_0, & r \leq r_0, \quad r_1 < r \leq r_2, \\ \varepsilon_1, & r_0 < r \leq r_1 \end{cases} \quad (2)$$

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq r_0, \quad r_1 < r < r_2, \\ V, & r_0 < r \leq r_1, \\ \infty, & r \geq r_2, \end{cases} \quad (3)$$

де m_e – маса вільного електрона.

Перейшовши в рівнянні (1) до безрозмірних змінних, вибравши за одиницю енергії $Ry = m_e e^4 / 2\hbar^2$ – енергію Рідберга, а за одиницю довжини $a_B = \hbar^2 / m_e e^2$ – радіус Бора та врахувавши сферичну симетрію задачі, рівняння для радіальної частини хвильової функції матиме вигляд:

$$-\frac{1}{m_0} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R_{n\ell}(r) - \frac{2Z}{\varepsilon_0 r} R_{n\ell}(r) = E_{n\ell} R_{n\ell}(r), \quad r \leq r_0, \quad r_1 < r \leq r_2 \quad (4)$$

$$-\frac{1}{m_1} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R_{n\ell}(r) + \left(V - \frac{2Z}{\varepsilon_1 r} \right) R_{n\ell}(r) = E_{n\ell} R_{n\ell}(r), \quad r_0 < r \leq r_1 \quad (5)$$

Загальні розв'язки рівнянь (4) і (5), виражаються через лінійну комбінацію вироджених гіпергеометричних функцій першого та другого роду $F(a, b, z)$ $G(a, b, z)$:

$$R_{n\ell}(r) = \begin{cases} A_0 e^{-\xi_0 r/2} r^\ell F(\ell+1-\eta_0, 2\ell+2, \xi_0 r), & r \leq r_0 \\ A_1 e^{-\xi_1 r/2} r^\ell \left[F(\ell+1-\eta_1, 2\ell+2, \xi_1 r) + B_1 G(\ell+1-\eta_1, 2\ell+2, \xi_1 r) \right], & r_0 < r \leq r_1, \\ A_2 e^{-\xi_0 r/2} r^\ell \left[F(\ell+1-\eta_0, 2\ell+2, \xi_0 r) + B_2 G(\ell+1-\eta_0, 2\ell+2, \xi_0 r) \right], & r_1 < r \leq r_2, \end{cases} \quad (6)$$

$$\xi_0 = -2 \text{sign}(E_{n\ell}) \sqrt{m_0(-E_{n\ell})}, \quad \eta_0 = \frac{2Z m_0}{\varepsilon_0 \xi_0}, \quad \xi_1^{e,h} = 2 \text{sign}(V - E_{n\ell}) \sqrt{m_1(V - E_{n\ell})}, \quad \eta_1 = \frac{2Z m_1}{\varepsilon_1 \xi_1}, \quad (7)$$

де $\text{sign}(x)$ – функція знаку, яка забезпечує єдиний аналітичний вигляд ХФ для станів з різними знаками енергій електрона. Коефіцієнти A_0, A_1, A_2, B_1, B_2 та енергетичний спектр електрона визначаються з граничних умов Бен-Даніель-Дюка [39] та умови нормування:

$$\int_0^{r_2} |R_{n\ell}(r)|^2 r^2 dr = 1. \quad (8)$$

На основі енергетичного спектру та хвильових функцій можна розрахувати енергію зв'язку електрона домішкою у стані (nl) та ефективний переріз фотоіонізації за формулами:

$$E_{nl}^b = E_{nl}^{Z=0} - E_{nl}^{Z=1} \quad (9)$$

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

де $\delta(E_b - \hbar\omega) = \frac{\Gamma}{\pi \{ [E_b - \hbar\omega]^2 + \Gamma^2 \}}$, $\hbar\omega$ - енергія фотона, n_r - показник заломлення, $\beta_{FS} = 1/237$ - постійна тонкої структури, відношення $F_{eff}/F_0 \approx 1$, $\Gamma = 0,4$ меВ [32]. У формулі (10) враховано те, що вектор поляризації світлової хвилі збігається з напрямком вісі OZ, інтеграл за кутовими змінними дає коефіцієнт $1/\sqrt{3}$, а правила відбору міжпідзонних квантових переходів для сферично симетричних систем - $\Delta\ell = \pm 1$. Сума за квантовим числом n враховує переходи в усі можливі кінцеві p -стани електрона. Енергії $E_{n1}^{Z=0}$ та хвильові функції $R_{n1}^{Z=0}$ станів електрона у відсутності домішки можна розрахувати двома методами: за формулами (6), (7) при $Z = 0$, або на основі функцій Беселя першого та другого роду [41].

Розрахунки коефіцієнта поглинання виконувалося для випадків наявності ($Z = 1$) та відсутності домішки ($Z=0$) за формулою [27]:

$$\alpha(\hbar\omega) = 4\pi\beta_{FS} \sum_n \frac{\left| \langle R_{n1} | r | R_{10} \rangle \right|^2 \rho \hbar\omega \hbar\Gamma_0}{(E_{n1} - E_{10} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_0)^2}, \quad (11)$$

де $\rho = 1/V$ - густина носіїв заряду в БСКТ; $\Gamma_0 = 1/\tau_0$, де $\tau_0 = 0.14 \text{ i}\hbar$ - час релаксації [27].

II. Результати розрахунків та обговорення

У числових розрахунках використовувались такі фізичні параметри БСКТ GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs: $x =$

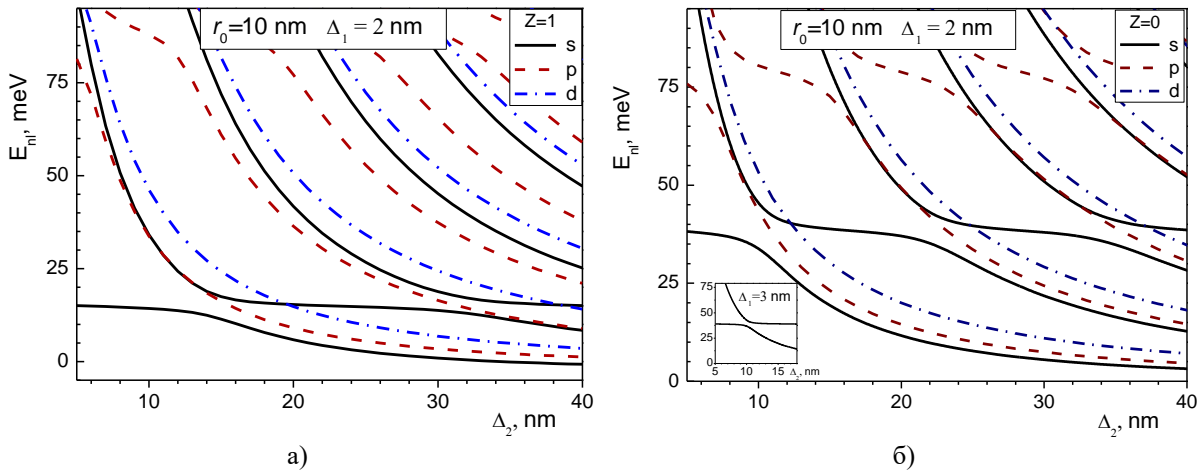


Рис. 2. Залежність енергетичного спектру електрона від Δ_2 при $r_0 = 10$ нм та $\Delta_1 = 2$ нм (а - $Z = 1$, б - $Z = 0$).

0,3; $m_0 = 0,067$; $m_1 = 0,067 + 0,083 x$; $\epsilon_0 = 13,18$; $\epsilon_1 = 13,18 - 3,12x$ [16]; $V = 0,6(1155x + 370x^2)$ меВ, $r_0 = 10$ нм, $r_1 = 12$ нм, $r_2 = 10 \div 20$ нм.

Залежність енергетичного спектру електрона в БСКТ ($r_0 = 10$ нм, $\Delta_1 = 2$ нм) від Δ_2 - розміру зовнішньої потенціальної ями наведена на рис. 2. У випадку відсутності домішки, при малих значеннях $\Delta_2 < r_0$ електрон локалізований в ядрі наносистеми, що відображається горизонтальною ділянкою на залежності $E_{10}(\Delta_2)$, а при $\Delta_2 > r_0$ знаходиться в зовнішній потенціальній ямі, де його енергія менша. В області антиперетину енергетичних рівнів E_{10} та E_{20} ($\Delta_2 \sim 10$ нм) відбувається зміна локалізації електрона. Ширина області антиперетину і його плавність визначаються шириною потенціального бар'єру Δ_1 . Залежності $E_{10}(\Delta_2)$ та $E_{20}(\Delta_2)$ в області антиперетину рівнів при $\Delta_1 = 3$ нм наведено на вставці до рис. 1,б. При наявності центральної донорної домішки (рис. 1,а), внаслідок кулонівського притягання, область антиперетину зміщується до $\Delta_2 \sim 14$ нм.

На рис. 3 наведено радіальний розподіл електронної густини $w(r) = |R_{n\ell}(r)|^2 r^2$ в основному та збуджених станах, які беруть участь у квантових переходах і визначають оптичні властивості наносистеми. Для відображення підібрано такі розміри зовнішньої потенціальної ями, які відповідають початку ($\Delta_2 = 12$ нм) і кінцю ($\Delta_2 = 18$ нм) області антиперетину. Це дає можливість побачити особливості перерозподілу електронної густини внаслідок антиперетину.

В області антиперетину рівнів невеликим збуренням можливо змінити просторовий розподіл

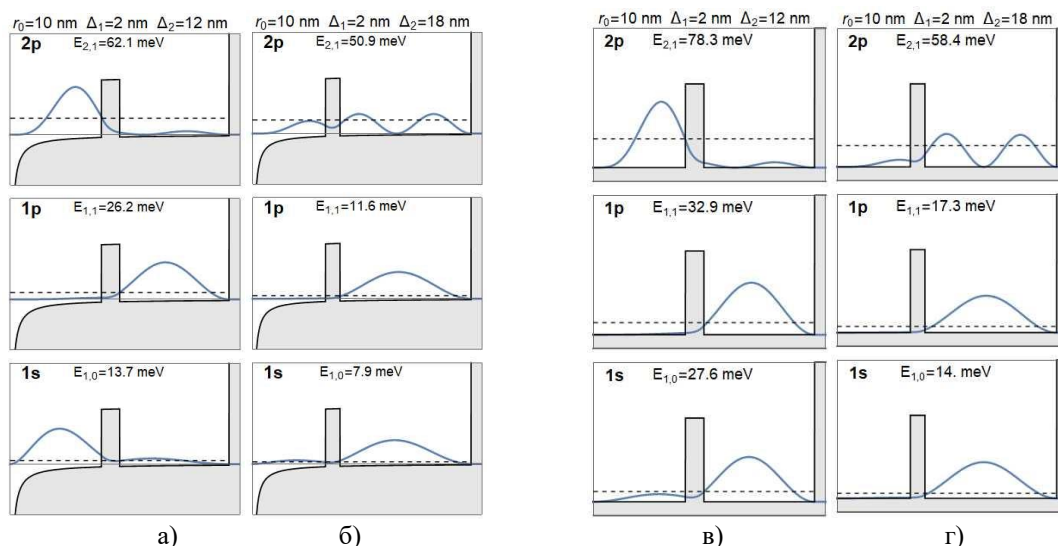


Рис. 3. Розподіл електронної густини в 1s, 1p, 2p станах: **а** – $\Delta_2 = 12$ нм, $Z = 1$; **б** – $\Delta_2 = 18$ нм, $Z = 1$; **в** – $\Delta_2 = 12$ нм, $Z = 0$; **г** – $\Delta_2 = 18$ нм, $Z = 0$.

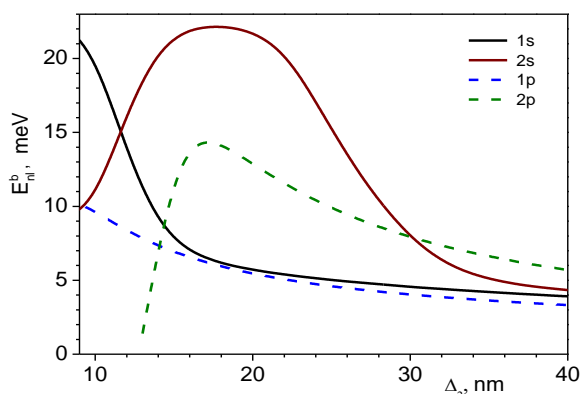


Рис. 4. Залежність енергії зв'язку електрона з домішкою $E_{nl}^b(\Delta_2)$ у станах 1s, 2s, 1p, 2p.

електронної густини, що повинно відобразитися на різноманітних оптичних характеристиках. Отже, за таких розмірів БСКТ найбільш чутлива до впливу зовнішніх полів.

На рис. 4 наведено залежність енергії зв'язку електрона з домішкою в s та p станах. Максимальні значення енергії зв'язку електрона з домішкою відповідають випадку розміщення його в ядрі наносистеми. В областях антикросингу енергетичних рівнів E_{10} та E_{20} , а також E_{11} та E_{21} відбувається перетин відповідних енергій зв'язку. Енергія зв'язку в p станах менша ніж енергія зв'язку в s станах внаслідок зміщення електрона до гетеромережі ядро-оболонка за рахунок відцентрового доданка в гамільтоніані.

На рис. 5 наведено спектральну залежність

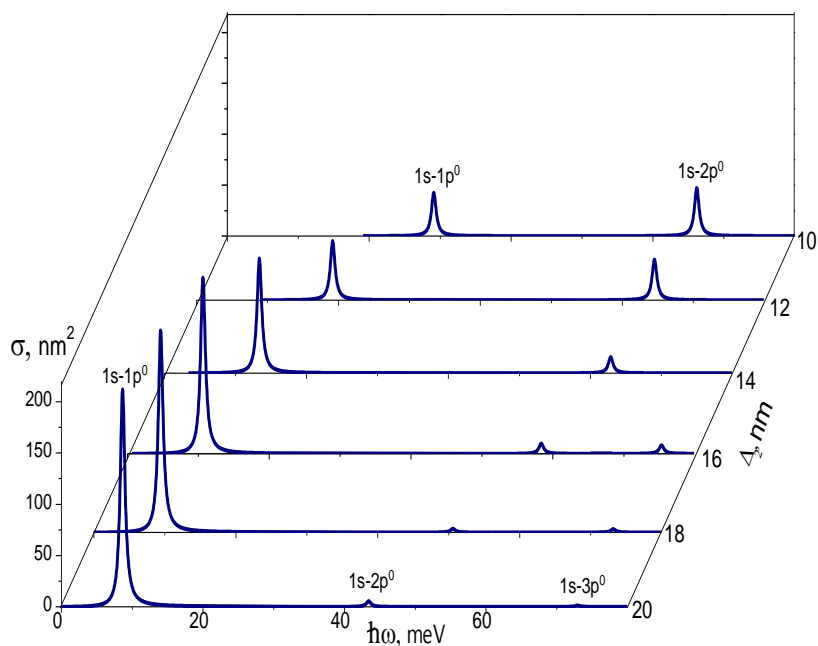


Рис. 5. Спектральна залежність перерізу фотоіонізації домішки в БСКТ при різних значеннях Δ_2 .

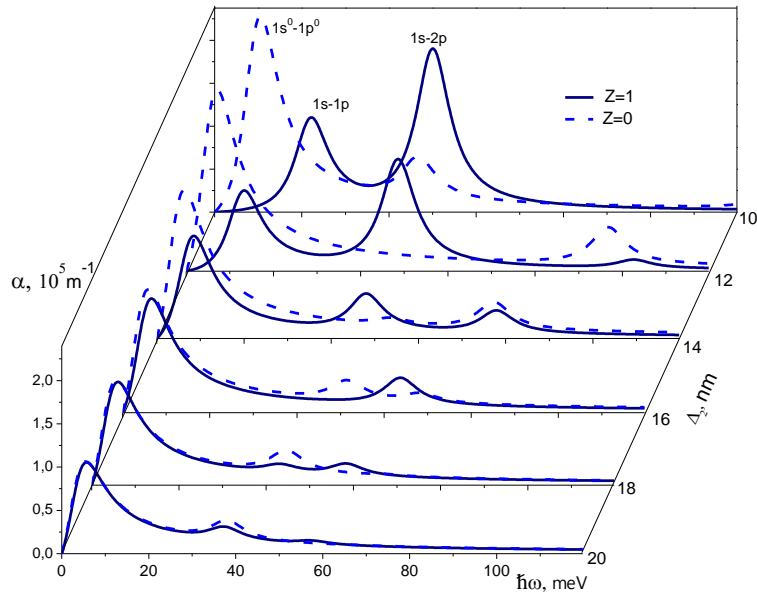


Рис. 6. Спектральна залежність коефіцієнта поглинання світла БСКТ при різних значеннях Δ_2 ($Z = 1$ – суцільні лінії, $Z = 0$ – штрихові лінії).

перерізу фотоіонізації домішки при різних значеннях Δ_2 . З рисунка видно, що при $\Delta_2 = 20$ нм основний вклад в ПФД вносить квантовий перехід $1s-1p^0$, що підтверджується перекриттям відповідних ХФ (рис. 3,б, г). Водночас величина дипольного моменту квантового переходу $1s-2p^0$ є значно меншою ніж $1s-1p^0$ внаслідок знакозміненості ХФ стану $2p^0$ ($R_{21}^{Z=0}$). При зменшенні розміру зовнішньої потенціальної ями, електрон у станах $1s$ та $2p^0$ локалізується в ядрі наносистеми, що спричиняє зменшення висоти першого і зростання другого максимуму ПФД, пов'язаного з квантовим переходом $1s-2p^0$. Крім цього, при зменшенні Δ_2 всі максимуми ПФД зміщуються в область більших енергій.

На рис. 6. наведено залежність коефіцієнта поглинання світла від енергії фотонів для БСКТ з домішкою (суцільні лінії) та без домішки (штрихові лінії) при різних значеннях Δ_2 . На відміну від ПФД вираз для КМП містить дипольний момент квантового переходу між станами при $Z = 1$ (при наявності домішки) або при $Z = 0$ (при відсутності домішки). Однак якісна поведінка піків поглинання із зменшенням величини Δ_2 дещо подібна до ПФД, тобто відбувається зміщення піків в область більших енергій та збільшення величини піків більш збуджених станів. Але у випадку відсутності домішки перший пік зростає зі збільшенням ширини зовнішньої потенціальної ями, проте за наявності домішки цей пік поглинання спадає і стає меншим за пік поглинання, пов'язаний з переходом у другий збуджений стан – $2p$.

Отримані зміни в спектральних залежностях $\sigma(\hbar\omega)$ та $\alpha(\hbar\omega)$, спричинені зменшенням зовнішньої потенціальної ями, дозволяють прогнозувати поведінку даних оптичних характеристик БСКТ при поміщенні її у зовнішнє постійне магнітне поле. Збільшення індукції

магнітного поля приводить до зменшення циклотронного радіуса електрона $r_c = \sqrt{2\hbar/eB}$, і якщо він стає меншим за радіус БСКТ, то магнітне поле буде підсилювати розмірне квантування і зменшувати ефективну ширину потенціальної ями в перпендикулярному до магнітного поля напрямку. Для зміни локалізації електрона при вибраних розмірах БСКТ необхідне магнітне поле з індукцією порядку 5 – 10 Тл. Дослідження впливу магнітного поля на оптичні властивості БСКТ GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs з домішкою будуть виконані в наступній роботі.

Висновки

У роботі отримані точні розв'язки рівняння Шредінгера для електрона в БСКТ GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs з центральною домішкою. На основі енергетичного спектру та ХФ електрона при різних значеннях розмірів зовнішньої потенціальної ями виконано дослідження перерізу фотоіонізації домішки та коефіцієнта міжпідзонного поглинання. Показано, що в області антикросингу енергетичних рівнів наносистема найбільш чутлива до впливу домішки та зовнішніх полів на її оптичні характеристики. Зменшення розмірів зовнішньої потенціальної ями БСКТ приводить до зміщення піків ПФД та КМП у високоенергетичну область та збільшення внеску в оптичні характеристики квантових переходів у більш збуджені стани. У разі відсутності домішки в БСКТ міжпідзонне поглинання переважно відбувається через квантовий перехід $1s^0-1p^0$, однак за наявності центральної домішки найбільше поглинання відбувається при більших енергіях фотонів через квантовий перехід $1s-2p$. Отримані результати досліджень дозволяють спрогнозувати вплив сильного магнітного поля на

Головацький В.А. – професор, д.ф.-м.н., професор кафедри теоретичної фізики та комп'ютерного моделювання
Чубрей М.В. – аспірант кафедри теоретичної фізики та комп'ютерного моделювання
Юрченко О.М. – доцент, к.ф.-м.н., доцент кафедри хімії та технологій

- [1] Z. Zhang, Chem. Mater 27, 1405 (2015); <https://doi.org/10.1021/cm5047269>.
- [2] G.Yu. Rudko, V.I. Fediv, I. Davydenko, E.G. Gule, O. Olar, A.O. Kovalchuk, Nanoscale Research Letters 11, 83 (2016); <https://doi.org/10.1186/s11671-016-1300-5>.
- [3] K. Chatterjee, S. Sarkar, R. K. Jagajjani, S. Paria, Adv Colloid Interf Sci. 209(7), 8 (2014); <https://doi.org/10.1016/j.cis.2013.12.008>.
- [4] S. Lahon, P. K. Jha, M. Mohan, Journal of Applied Physics 109, 5 (2011); <https://doi.org/10.1063/1.3559271>.
- [5] S. Jiao, Q. Shen, I. Mora-Seró, J. Wang, Z. Pan, K. Zhao, Y. Kuga, X. Zhong, J. Bisquert, ACS Nano 9(1), 908 (2015); <https://doi.org/10.1021/nn506638n>.
- [6] J.-H. Yuan, W.-F. Xie, L.-L. He, Commun. Theor. Phys. 52(4), 710 (2009); <https://doi.org/10.1088/0253-6102/52/4/306102/52/4/30>.
- [7] W. Xie, Physica B 405(16), 3436 (2010); <https://doi.org/10.1016/j.physb.2010.05.019>.
- [8] E. Sadeghi, Superlattice Microstructures 50(4), 331 (2011); <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2011.07.011>.
- [9] C. Dane, H. Akbas, A. Guleroglu, S. Minez, and K. Kasapoglu, Physica E 44(1), 186 (2011); <https://doi.org/10.1016/j.physe.2011.08.012>.
- [10] L.M. Burileanu, J. Luminescence 145, 684 (2014); <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2013.08.043>.
- [11] Corella Madueno, R. Rosas, J.L. Marin, R. Riera, J. Appl. Phys. 90(5), 2333 (2001); <https://doi.org/10.1063/1.1329143>.
- [12] E. Feddi, A. Talbi, M.E. Mora-Ramos, M.El. Haouari, F. Dujardin, and C.A. Duque, Physica B 524(11), 64 (2017); <https://doi.org/10.1016/j.physb.2017.08.057>.
- [13] M.G. Barseghyan, A.A. Kirakosyan, and C.A. Duque, Eur. Phys. J. B 72(11), 521 (2009); <https://doi.org/10.1140/epjb/e2009-00391-0>.
- [14] S. Li, L. Shi, and Z.-W. Yan, Mod. Phys. Lett. B 34, 2050153 (2020); <https://doi.org/10.1142/s0217984920501535>.
- [15] V.A.Holovatsky, I.B. Frankiv, Journal of Optoelectronics and Advanced Materials 15(1-2), 88 (2013).
- [16] F.K. Boz, S. Aktas, A. Bilekkaya, S.E. Okan, Applied Surface Science 256(12), 3832 (2010); <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2010.01.036>.
- [17] I. Karabulut, S. Baskoutas, Journal of Applied Physics 103(7), 1 (2008); <https://doi.org/10.1063/1.2904860>.
- [18] Z. Zeng, C.S. Garoufalis, S. Baskoutas, A.F. Terzis, Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics 376 (42-43), 2712 (2012); <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2012.07.032>.
- [19] Z. Zeng, C.S. Garoufalis, A.F. Terzis, S. Baskoutas, Journal of Applied Physics 114(2), 023510 (2013); <https://doi.org/10.1063/1.4813094>.
- [20] M. Cristea, E.C. Niculescu, European Phys. J. B, 85(6), 191 (2012); <https://doi.org/10.1140/epjb/e2012-21051-2>.
- [21] E.C. Niculescu, C. Stan, M. Cristea, C. Truscă, Chemical Physics, 493, 32 (2017); <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2017.06.004>.
- [22] M. Cristea, Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures 103, 300 (2018); <https://doi.org/10.1016/j.physe.2018.06.019>.
- [23] C. Heyn, C.A. Duque, Scientific Reports 10(1), 1 (2020); <https://doi.org/10.1038/s41598-020-65862-9>.
- [24] B. Çakir, U. Atav, Y. Yakar, A. Özmen, Chem. Phys. 475, 61 (2016); <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2016.06.010>.
- [25] D.-M. Liu, W.-F. Xie, Commun. Theor. Phys. 51(5), 919 (2009); <https://doi.org/10.1088/0253-6102/51/5/32>.
- [26] E.B. Al, E. Kasapoglu, S. Sakiroglu, H. Sari, I. Sökmen, and C.A. Duque, Physica E 119, 114011 (2020); <https://doi.org/10.1016/j.physe.2020.114011>.
- [27] E.B. Al, E. Kasapoglu, H. Sari, I. Sökmen, Physica B: Condensed Matter 613, 412874 (2021); <https://doi.org/10.1016/j.physb.2021.412874>.
- [28] V.I. Boichuk, I.V. Bilynskyi, R.Y. Leshko, and L.M. Turyanska, Physica E 44(2), 476 (2011); <https://doi.org/10.1016/j.physe.2011.09.025>.
- [29] V.A. Holovatsky, M.Y. Yakhnevych, and O.M. Voitsekhivska, Condens. Matter Phys. 21, 13703 (2018); <https://doi.org/10.5488/CMP.21.13703>.
- [30] V.A. Holovatsky, I.B. Bernik, and M.Y. Yakhnevych, Physica B 508, 112 (2017); <https://doi.org/10.1016/j.physb.2016.12.024>.

- [31] V.A. Holovatsky, O.M. Voitsekhivska, and M.Y. Yakhnevych, *Superlattices and Microstructures* 116, 9 (2018); <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2018.02.006>.
- [32] V. Holovatsky, M. Chubrey, and O. Voitsekhivska, *Superlattices and Microstructures* 145, 106642 (2020); <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2018.02.006>.
- [33] A.S. Baimuratov, I.D. Rukhlenko, V.K. Turkov, I.O. Ponomareva, M.Y. Leonov, T.S. Perova, K. Berwick, A.V. Baranov, A.V. Fedorov, *Scientific Reports*, 4, 1 (2014); <https://doi.org/10.1038/srep06917>.
- [34] V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, R.Y. Leshko, *Condensed Matter Physics* 13(1), 13702 (2010); <https://doi.org/https://doi.org/10.5488/CMP.13.13702>.
- [35] Y. Naimi, A.R. Jafari, *Journal of Computational Electronics* 11(4), 414 (2012); <https://doi.org/https://doi.org/10.1007/s10825-012-0421-z>.
- [36] R. Kostić, D. Stojanović, *Journal of Nanophotonics* 6(1), 061606 (2012); <https://doi.org/https://doi.org/10.1117/1.jnp.6.061606>.
- [37] I.F.I. Mikhail, S.B.A. El Sayed, *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures* 43(7), 1371 (2011); <https://doi.org/10.1016/j.physe.2011.03.007>.
- [38] F. Rahimi, T. Ghaffary, Y. Naimi, H. Khajehazad, *Optical and Quantum Electronics* 53, 47 (2021); <https://doi.org/10.1007/s11082-020-02695-w>.
- [39] V. Holovatsky, I. Bernik, O. Voitsekhivska, *Acta Phys. Pol. A*, 125, 1 (2014); <https://doi.org/10.12693/APhysPolA.125.93>.
- [40] V.A. Holovatsky, O.M. Voitsekhivska, M.Y. Yakhnevych, *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures* 93, 295 (2017); <https://doi.org/10.1016/j.physe.2017.06.019>.
- [41] V. Holovatsky, I. Bernik, M. Yakhnevych, *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 83 (2016); <https://doi.org/10.1016/j.physe.2016.04.035>.
- [42] M.V. Chubrey, V.A. Holovatsky, C.A. Duque, *Philosophical Magazine*, (in press) (2021); <https://doi.org/10.1080/14786435.2021.1979267>.

V.A. Holovatsky¹, M.V. Chubrey¹, O.M. Yurchenko²

Impurity Photoionization Cross-Section and Intersubband Optical Absorption Coefficient in Multilayer Spherical Quantum Dots

¹Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University, Chernivtsi, Ukraine, v.holovatsky@chnu.edu.ua

²Lesya Ukrainka Volyn National University, Lutsk, Ukraine, yurchenko.oksana@vnu.edu.ua

Energy spectrum, wave functions and binding energies of the electron to the donor impurity ion located in the center of a multilayer spherical quantum dot (MSQD) consisting of a core (GaAs) and two spherical shells ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ and GaAs) were studied within the effective mass approximation. Based on the exact wave functions of the electron expressed in terms of Coulomb functions of the first and second kind, the spectral dependences of the photoionization cross section of the impurity (PCS) and the intersubband optical absorption coefficient (OAC) for various geometric dimensions of the nanostructure were calculated.

It is shown that the decrease in the width of the external potential well changes the localization of the electron in the nanosystem which significantly affects the binding energy of the electron with the impurity, photoionization cross section and interband absorption coefficient. The position of the PCS peak associated with the quantum transition of an electron from the ground state to the $1p^0$ state shifts to the region of higher energies, and its height decreases. At the same time, the height of PCS peaks associated with quantum transitions to higher excited states ($2p^0$, $3p^0$) increases.

The presence of impurities and changes in the MSQD size significantly affect the intersubband absorption coefficient. Decrease of the external potential well width in the absence of impurities leads to a monotonous increase in OAC through the first excited state, and in the presence of a central impurity, absorption through states with higher energy increases.

Obtained results enable prediction of the specifics of the effect of the magnetic field on the optical properties of MSQD with two potential wells.

Keywords: multilayer quantum dot, donor impurity, impurity photoionization cross section, impurity binding energy, optical absorption coefficient.