

PACS numbers: 73.20.Hb, 73.21.La, 78.67.Hc

## Примесные состояния электронов в сферических наносистемах

Н. В. Ткач, В. А. Головацкий, И. Б. Франкив

*Черновицкий национальный университет имени Юрия Федьковича,  
ул. Коцюбинского, 2,  
58012 Черновцы, Украина*

В приближении эффективной массы исследован спектр электрона в сферической квантовой точке (КТ) с одной и двумя водородоподобными примесями. Выполнены оценки точности энергий и волновых функций, полученных вариационным методом и методами теории возмущений. Показано хорошее согласие результатов вариационного метода с точными решениями уравнения Шредингера для центральной донорной примеси и результатами теории возмущений для случая внешней примеси. В случае двух донорных примесей, расположенных в центре КТ, энергия основного состояния электрона совпадает с известным результатом для дважды ионизированной примеси.

У наближенні ефективної маси досліджено спектр електрона в сферичній квантовій точці (КТ) з однією та двома воднеподібними домішками. Виконано оцінки точності енергій і хвильових функцій, одержаних варіаційною методою і методами теорії збурень. Продемонстровано добре узгодження результатів варіаційної методи з точними розв'язками рівняння Шредингера для центральної донорної домішки і результатами теорії збурень для випадку зовнішньої домішки. У випадку двох донорних домішок, розміщених у центрі КТ, енергія основного стану електрона збігається з відомим результатом для двічі йонізованої домішки.

Electron spectrum within the spherical quantum dot with one and two hydrogen-like donor impurities is investigated by the effective mass approximation. Accuracy evaluation for the electron energy spectrum and wave functions obtained by the variational method and the perturbation theory is performed. The results of the variational method agree with an exact solution of the Schrödinger equation for the on-centre donor impurity and with a result obtained by the perturbation theory for an inner impurity. The ground-state energy of an electron coincides with a well-known energy of the doubly ionized donor impurity.

**Ключевые слова:** квантовая точка, донорная примесь, вариационный ме-

тод, метод теории возмущений.

*(Получено 16 ноября 2010 г.)*

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Современные нанотехнологии позволяют создавать новые полупроводниковые приборы, использующие особенности энергетических спектров наносистем различных геометрий. Существование примесей в наноструктурах существенно влияет на их оптические, электрические и магнитные свойства и таким образом изменяет физические характеристики созданных на их основе приборов.

Донорная примесь в КТ смещает дискретный энергетический спектр электронов в низкоэнергетическую область, уменьшает расстояние между энергетическими уровнями и приводит к увеличению их количества. При этом изменяется распределение вероятности нахождения электрона в наносистеме, что существенно влияет на силы осцилляторов квантовых переходов [1, 2].

Таким образом, легирование полупроводниковых наносистем может улучшать характеристики полупроводниковых приборов. Этим обусловлено большое количество теоретических исследований примесных состояний в наносистемах. Большинство таких исследований основано на методе эффективной массы и приближении диэлектрического континуума, что ограничивает рассмотрение только мелких примесей, которые хорошо описываются в рамках водородоподобной модели.

Энергетический спектр квазичастиц в сферических квантовых точках с центральной примесью в приближении эффективных масс определяется точными решениями уравнения Шредингера [1, 3]. В случае нецентральной примеси возможны только приближенные решения [4, 5].

В данной работе исследуется точность вариационного метода и теории возмущений для расчета энергий и волновых функций нескольких нижних состояний электрона, связанного донорной примесью, расположенной как внутри КТ, так и в окружающей ее матрице. Используя апробированные таким образом методы, выполнен расчет энергии основного состояния электрона в сферической квантовой точке, взаимодействующего с двумя донорными примесями, одна из которых — центральная.

## 2. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА И ЕГО РЕШЕНИЯ ДЛЯ ЭЛЕКТРОНА В КТ С ДОНОРНОЙ ПРИМЕСЬЮ

Рассмотрим сферическую квантовую точку (среда 0), помещенную в

полупроводниковую матрицу (среда 1). На расстоянии  $r_0$  от центра КТ расположена донорная примесь. Систему координат выберем так, чтобы ее начало совпадало с центром КТ, а ось  $Oz$  проходила через положение примеси. За начало отсчета энергии выберем положение дна зоны проводимости полупроводникового материала квантовой точки.

$$-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{\mu(r)} \nabla \Psi_{nl}(\mathbf{r}) + \left[ U(r) - \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} \right] \Psi_{nl}(\mathbf{r}) = E_{nl}^+ \Psi_{nl}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где

$$\mu(r) = \begin{cases} m_0, & r \leq 0, \\ m_1, & r > R, \end{cases} \quad U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq 0, \\ V_0, & r > R. \end{cases} \quad (2)$$

Величина  $\varepsilon$  — усредненная диэлектрическая проницаемость, учитывающая особенности кулоновского взаимодействия в неоднородной среде.  $E_{nl}^+$  — энергетический спектр электрона в КТ с донорной примесью.

### 2.1. Донорная примесь расположена в центре КТ

В случае  $r_0 = 0$ , решая уравнение Шредингера (1) в сферических координатах, получим уравнение для радиальной части волновой функции:

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R_{nl}(r) + \left[ E_{nl}^+ + \frac{e^2}{\varepsilon r} \right] R_{nl}(r) = 0, \quad r \leq R, \quad (3)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_1} \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R_{nl}(r) + \left( E_{nl}^+ - V_0 + \frac{e^2}{\varepsilon r} \right) R_{nl}(r) = 0, \quad r > R. \quad (4)$$

Используя обозначения

$$\xi_0 = \frac{\sqrt{8m_0(-E_{nl}^+)}}{\hbar}, \quad \eta_0 = \pm \frac{2m_0 e^2}{\varepsilon \xi_0 \hbar^2}, \quad \xi_1 = \frac{\sqrt{8m_1(V_0 - E_{nl}^+)}}{\hbar}, \quad \eta_1 = \frac{2m_1 e^2}{\varepsilon \xi_1 \hbar^2} \quad (5)$$

(знак «+» для  $E_{nl}^+ > 0$ , знак «-» для  $E_{nl}^+ < 0$ ).

Решения дифференциальных уравнений (3) и (4) будут иметь вид:

$$R_{nl}(r) = \begin{cases} A_0 \exp[-\xi_0 r / 2] r^\ell F(\ell + 1 - \eta_0, 2\ell + 2, \xi_0 r), & r \leq R, \\ A_1 \exp[-\xi_1 r / 2] r^\ell G(\ell + 1 - \eta_1, 2\ell + 2, \xi_1 r), & r > R, \end{cases} \quad (6)$$

где функции  $F(a, b, z)$  та  $G(a, b, z)$  — вырожденные гипергеометрические функции первого и второго рода.

Дискретный энергетический спектр электрона в сферической КТ с центральной донорной примесью получается из стандартных граничных условий

$$\frac{1}{m_0} \left. \frac{\partial \ln(R_{n\ell}^{(0)}(r))}{\partial r} \right|_{r=R} = \frac{1}{m_1} \left. \frac{\partial \ln(R_{n\ell}^{(1)}(r))}{\partial r} \right|_{r=R}, \quad (7)$$

а коэффициенты  $A_0$  и  $A_1$  — из условий сшивки волновых функций

$$R_{n\ell}^{(0)}(r)|_{r=R} = R_{n\ell}^{(1)}(r)|_{r=R} \quad (8)$$

и условий нормировки

$$\int_0^R |R_{n\ell}^{(0)}(r)|^2 r^2 dr + \int_R^\infty |R_{n\ell}^{(1)}(r)|^2 r^2 dr = 1. \quad (9)$$

## 2.2. Нецентральная донорная примесь (вариационный метод)

Для основного состояния (1s) вариационную функцию выбираем в виде произведения волновой функции основного состояния электрона в сферической КТ без примеси и множителя  $\exp(-\lambda|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|)$ , который описывает кулоновское взаимодействие электрона с донорной примесью:

$$\Psi_{10}^{\text{var}}(\mathbf{r}) = \begin{cases} A \frac{\sin(k_{10}r)}{r} \exp\left[-\lambda\sqrt{r^2 + r_0^2 - 2rr_0 \cos\theta}\right], & r \leq R, \\ B \frac{\exp(-\chi_{10}r)}{r} \exp\left[-\lambda\sqrt{r^2 + r_0^2 - 2rr_0 \cos\theta}\right], & r > R, \end{cases} \quad (10)$$

где

$$k_{10} = \sqrt{\frac{2m_0 E_{10}}{\hbar}}, \quad \chi_{10} = \sqrt{\frac{2m_1(V_0 - E_{10})}{\hbar}}, \quad (11)$$

$E_{10}$  — энергия основного состояния электрона в КТ без примеси;  $\lambda$  — вариационный параметр. Коэффициенты  $A$  и  $B$  определяются из условий нормировки и непрерывности волновой функции при  $r = R$ :

$$A = \frac{e^{R\lambda}}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{2 \sin^2(k_{10}R)}{\chi_{10} + \lambda} - \frac{k_{10}^2(1 - e^{2\chi_{10}R}) + 2\lambda^2 \sin^2(k_{10}R) + k_{10}\lambda \sin(2k_{10}R)}{k_{10}^2 + \lambda^2} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (12)$$

Энергию основного состояния электрона в КТ с примесью определяем путем минимизации:

$$E_{10}^{\text{var}} = \min_{\lambda} \iiint \psi_{10}^{\text{var}*}(\mathbf{r}) H \psi_{10}^{\text{var}}(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}. \quad (13)$$

В предельном случае  $r_0 = 0$  интегралы, входящие в (12), рассчитываются аналитически:

$$E_{10}^{\text{var}} = A^2 \min_{\lambda} [\langle T_0 \rangle + \langle T_1 \rangle + \langle U_0 \rangle + \langle U_1 \rangle], \quad (14)$$

где

$$\langle T_0 \rangle = \frac{\pi e^{-2R\lambda}}{\lambda m_0} \left[ \lambda^2 \sin^2(k_{10}R) - \lambda k_{10} \sin(2k_{10}R) - k_{10}^2 (1 - e^{2R\lambda}) \right],$$

$$\langle T_1 \rangle = -\frac{2\pi e^{-2R\lambda}}{m_1} \sin^2(k_{10}R)(\chi_{10} + \lambda),$$

$$\langle U_0 \rangle = -\frac{2\pi}{\varepsilon} \times$$

$$\times \left[ \ln(k_{10}^2 / \lambda^2 + 1) + 2 \operatorname{Ei}(-2R\lambda) - \operatorname{Ei}(-2ik_{10}R - 2R\lambda) - \operatorname{Ei}(2ik_{10}R - 2R\lambda) \right],$$

$$\langle U_1 \rangle = -\frac{8\pi e^{2\chi_{10}R}}{\varepsilon} \sin^2(k_{10}R) \operatorname{Ei}(-2\chi_{10}R - 2\lambda R) + V_0 \frac{e^{2\chi_{10}R}}{\chi_{10} + \lambda} \sin^2(k_{10}R).$$

### 2.3. Нецентральная донорная примесь (теория возмущений)

В случае больших значений  $r_0$ , кулоновское взаимодействие мало по сравнению с потенциалом размерного квантования, и его можно рассматривать как возмущение к основному гамильтониану

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{\mu(r)} \nabla + U(r). \quad (15)$$

Энергетический спектр электрона в КТ с нецентральной примесью в первом приближении по теории возмущений определяется формулой  $E_{nlm}^{\text{pert1}} = E_{nlm} + \Delta E_{nlm}$ , где

$$\Delta E_{nlm} = -\langle \Psi_{nlm}^* \left| \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} \right| \Psi_{nlm} \rangle. \quad (16)$$

Используя разложение

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \frac{4\pi}{2\ell+1} \frac{[\min(r, r_0)]^{\ell}}{[\max(r, r_0)]^{\ell+1}} Y_{\ell m}^*(\theta, \phi) Y_{\ell m}(\theta_0, \phi_0), \quad (17)$$

для основного состояния получим:

$$|\Delta E_{100}| = \frac{e^2 N^2}{\varepsilon} \times \left[ \int_0^R \frac{\sin^2(k_{10}r)}{r^2} \frac{1}{\max(r, r_0)} dr + \int_R^\infty \frac{\exp[2\chi_{10}(R-r)] \sin^2(k_{10}R)}{r^2 \max(r, r_0)} dr \right], \quad (18)$$

где

$$N = \left[ \int_0^R \frac{\sin^2(k_{10}r)}{r^2} dr + \int_R^\infty \sin^2(k_{10}R) \frac{\exp[2\chi_{10}(R-r)]}{r^2} dr \right]^{-1/2}, \quad (19)$$

а величины  $k_{10}$  и  $\chi_{10}$  определяются из (11).

Если  $r_0 \ll R$ , в основной гамильтониан включим потенциальную энергию кулоновского взаимодействия с центральной примесью:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{\mu(r)} \nabla + U(r) - \frac{e^2}{\varepsilon r}. \quad (20)$$

Потенциал возмущения состоит из разности потенциалов центральной и нецентральной примеси:

$$V = \frac{e^2}{\varepsilon r} - \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}. \quad (21)$$

Энергетический спектр электрона в КТ с нецентральной примесью в первом приближении теории возмущений определяется соотношением  $E_{nlm}^{peri2} = E_{nl}^+ + \Delta E_{nlm}^0 + \Delta E_{nlm}$ , где  $E_{nl}^+$  — энергия электрона в КТ с центральной примесью,

$$\Delta E_{nlm}^0 = \left\langle \Psi_{nlm}^* \left| \frac{e^2}{\varepsilon r} \right| \Psi_{nlm} \right\rangle, \quad (22)$$

а  $\Delta E_{nlm}$  задана соотношением (16).

### 3. ЭНЕРГИЯ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОНА В СФЕРИЧЕСКОЙ КТ С ДВУМЯ ДОНОРНЫМИ ПРИМЕСЯМИ

Если одна из примесей расположена в центре КТ, гамильтониан задачи будет иметь вид

$$H = H_0 - \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}, \quad (23)$$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{\mu(r)} \nabla + U(r) - \frac{e^2}{\varepsilon r}, \quad (24)$$

где  $\mu(r)$  и  $U(r)$  определены уравнением (3).

Используя точные решения уравнения Шредингера с гамильтонианом (20), выраженные через вырожденные гипергеометрические функции первого и второго рода  $F(a, b, z)$  и  $G(a, b, z)$ , построим вариационные функции, описывающие взаимодействие электрона с двумя донорными примесями:

$$\Psi_1^{\text{var}}(r) = \begin{cases} A e^{-\xi_0 r/2} r^\ell F(\ell + 1 - \eta_0, 2\ell + 2, \xi_0 r) \exp[-\lambda \sqrt{r^2 + r_0^2 - 2rr_0 \cos \theta}], & r \leq R, \\ B e^{-\xi_1 r/2} r^\ell G(\ell + 1 - \eta_1, 2\ell + 2, \xi_1 r) \exp[-\lambda \sqrt{r^2 + r_0^2 - 2rr_0 \cos \theta}], & r > R. \end{cases} \quad (25)$$

При этом величины  $\zeta_0, \eta_0, \zeta_1, \eta_1$  определяются соотношениями (5) через энергию основного состояния  $E_{10}^+$  электрона в КТ с центральной примесью.

Энергия основного состояния электрона в КТ с двумя водородоподобными примесями  $E_{1^{++}}$  определяется из условия минимума функционала:

$$E_{1^{++}} = \min_{\lambda} \iiint \psi_1^{\text{var}*}(\mathbf{r}) H \psi_1^{\text{var}}(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}. \quad (26)$$

Расчеты показывают, что основной вклад в энергию электрона вносит взаимодействие с центральной примесью; поэтому влияние нецентральной примеси можно рассматривать в рамках теории возмущений.

#### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ ЭНЕРГИЙ И ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОНА В КТ С ДОНОРНЫМИ ПРИМЕСЯМИ

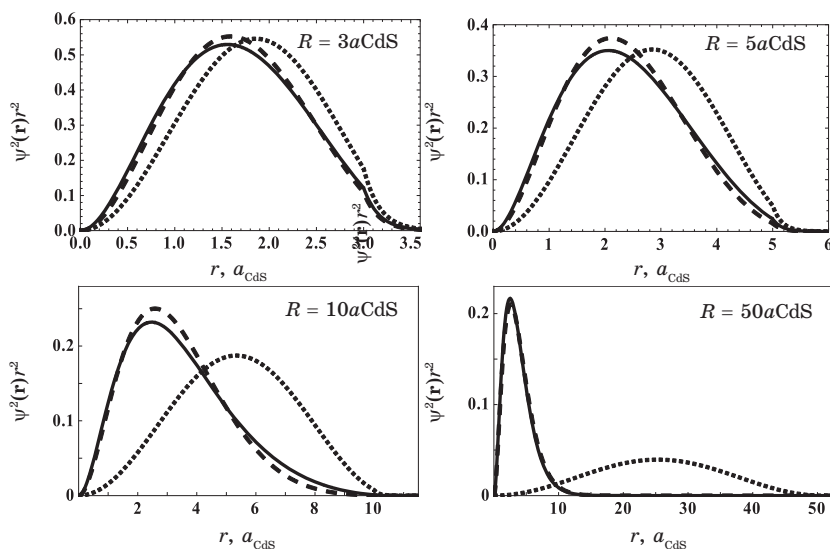
В численных расчетах использовались параметры сферической наносистемы CdS/SiO<sub>2</sub>:  $m_0 = 0,2m_e$ ,  $m_1 = 0,42m_e$  — эффективные массы электрона в КТ и матрице соответственно;  $m_e$  — масса свободного электрона,  $a_{\text{CdS}} = 5,818 \text{ \AA}$  — постоянная решетки;  $\varepsilon_0 = 5,5$ ,  $\varepsilon_1 = 4,9$  — диэлектрические постоянные наноразмерного материала CdS и матрицы SiO<sub>2</sub> соответственно;  $V_0 = 2,7 \text{ эВ}$  — смещение зон проводимости на границе раздела сред.

Для оценки точности вариационного метода при расчете энергии основного состояния электрона в сферической КТ CdS/SiO<sub>2</sub> с центральной примесью в таблице приведены результаты численных расчетов, полученных вариационным методом путем минимизации функционала (16) при  $r_0 = 0$  и в результате точного решения уравнения Шредингера.

Из таблицы видно, что точность вариационного метода увеличи-

ТАБЛИЦА. Результаты численных расчетов энергий  $E_{10}$ ,  $E_{10}^{\text{var}}$  та  $E_{10}^+$ .

$R, a_{\text{CdS}}$	$E_{10}^+$ , мэВ (точн.)	$E_{10}^{\text{var}}$ , мэВ (варац.)	$E_{10}^{\text{var}} - E_{10}^+$	$\frac{1}{2\lambda}$ , $a_{\text{CdS}}$	$E_{10}$ , мэВ (без примеси)
3	81,50	90,45	8,95	28,3	401,82
4	-7,78	-2,60	5,18	24,8	250,59
5	-47,86	-44,23	3,63	23,0	170,88
8	-83,31	-81,22	2,09	19,5	73,55
10	-87,97	-86,46	1,51	17,8	48,64
15	-89,87	-89,34	0,53	15,7	22,58
20	-89,95	-89,77	0,18	14,8	12,99
25	-89,95	-89,88	0,07	14,5	8,42
30	-89,950	-89,916	0,034	14,2	5,90
35	-89,950	-89,932	0,018	14,1	4,36
50	-89,950	-89,946	0,004	13,9	2,16

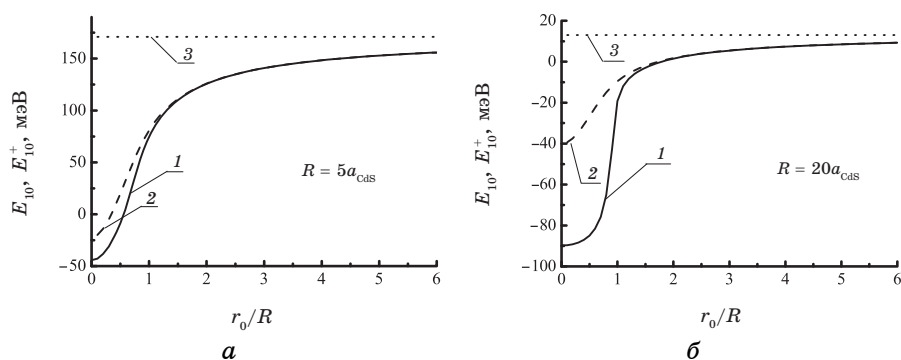


**Рис. 1.** Распределение радиальной вероятности нахождения электрона в наносистеме: точное решение — сплошная линия; вариационный метод при  $r_0 = 0$  — штриховая линия; КТ без примеси — точечная линия.

вается с увеличением радиуса КТ. Вариационный параметр  $\lambda$  определяет характерный радиус локализации электрона примесью  $a = 1/(2\lambda)$ .

На рисунке 1 представлено распределение радиальной вероятности





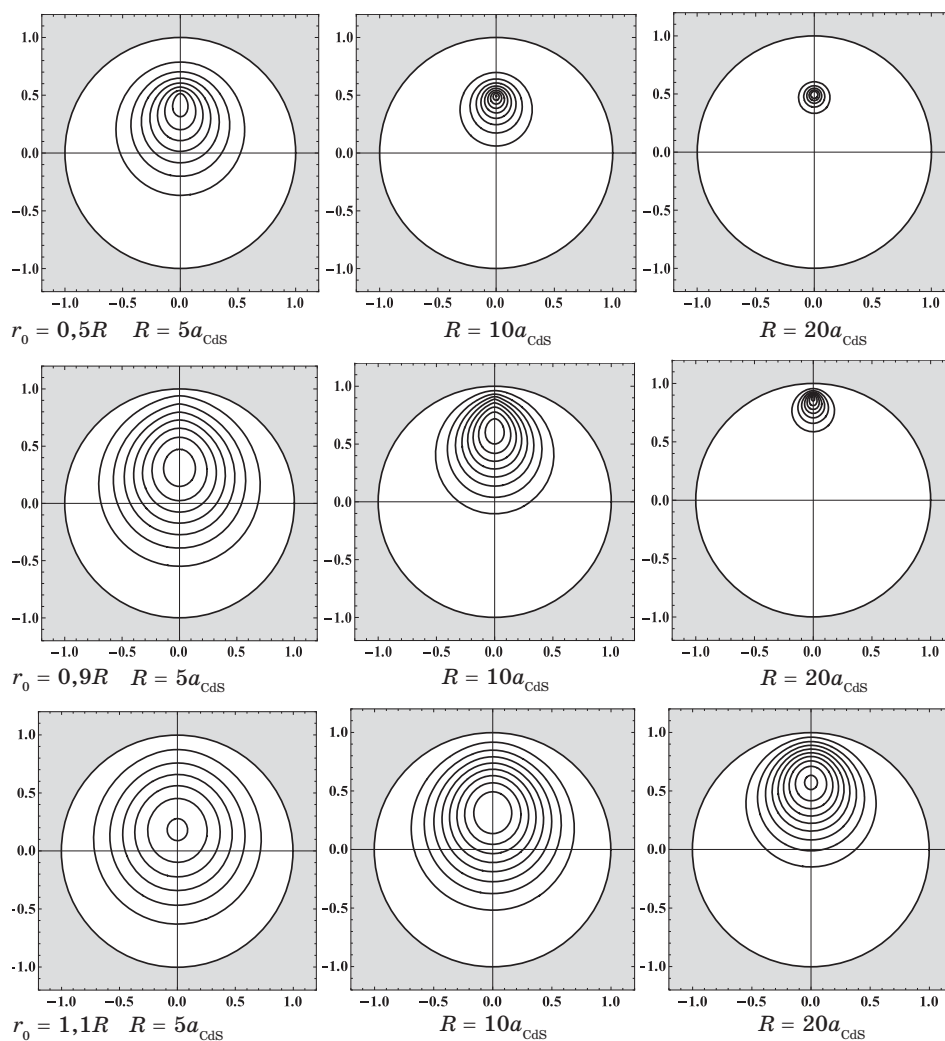
**Рис. 2.** Зависимость основного состояния электрона в КТ CdS/SiO<sub>2</sub> от положения донорной примеси: 1 — вариационный метод; 2 — теория возмущений; 3 — без примеси. (а)  $R = 5a_{\text{CdS}}$ ; (б)  $R = 20a_{\text{CdS}}$ .

сти нахождения электрона в наносистеме. Из рисунка видно, что наличие примеси существенно влияет на наиболее вероятное положение электрона, особенно это проявляется для квантовых точек, радиус которых больше радиуса локализации примесью. Изменения в распределении вероятности нахождения квазичастицы влияет на силы осцилляторов квантовых переходов [1].

Зависимость энергии основного состояния электрона в КТ CdS/SiO<sub>2</sub> от положения примеси приведена на рис. 2. Из рисунка видно, что максимальный сдвиг основного уровня электрона осуществляется вследствие его взаимодействия с донорной примесью, расположенной в центре КТ. По мере удаления примеси от центра КТ энергия основного состояния смещается в область больших энергий. Если примесь расположена вне КТ, энергия кулоновского притяжения значительно меньше энергии размерного квантования, поэтому результаты теории возмущений хорошо согласуются с результатами вариационного метода. Такое согласие проявляется тем лучше, чем меньше размеры КТ, поскольку при этом возрастает потенциальная энергия размерного квантования.

Влияние размеров КТ и положения донорной примеси на локализацию электрона можно проанализировать из распределения плотности вероятности нахождения электрона в КТ (рис. 3).

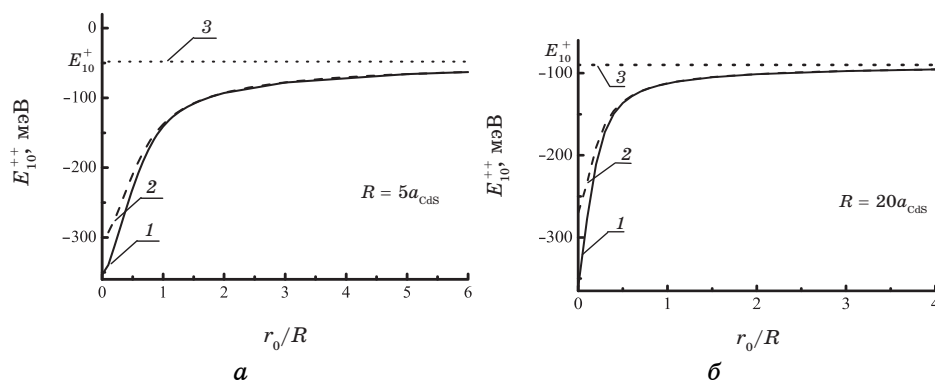
Из рисунка 3 видно, что в случае  $r_0 = 0,5R$  наиболее вероятное положение электрона совпадает с положением примеси при всех радиусах КТ. Если примесь расположена вблизи высокой потенциальной стенки ( $r_0 = 0,9R$ ), то наиболее вероятное положения электрона совпадает с положением примеси только при достаточно больших КТ. Для случая примеси, расположенной вне КТ, электрон остается в сферической потенциальной яме квантовой точки при разных ее радиусах. При малом радиусе КТ вследствие сильно-



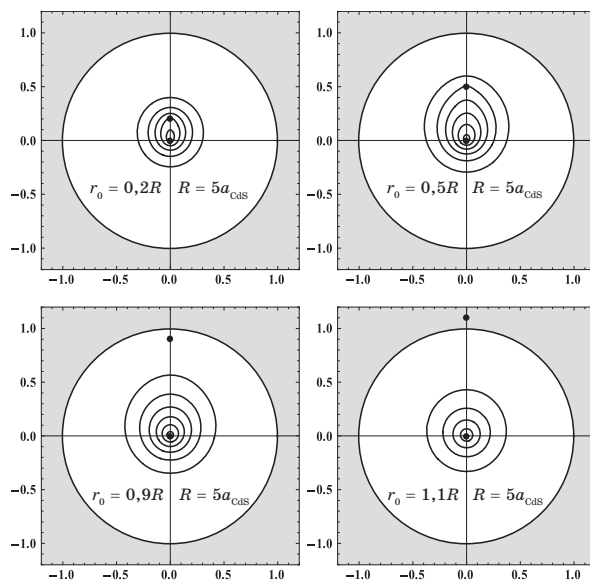
**Рис. 3.** Распределение плотности вероятности нахождения электрона в КТ с  $R = 5a_{\text{CdS}}$ ,  $10a_{\text{CdS}}$ ,  $20a_{\text{CdS}}$  при разных положениях примеси:  $r_0 = 0,5R$ ,  $0,9R$ ,  $1,1R$ .

го размерного квантования наиболее вероятным положением электрона является центр квантовой точки, а с увеличением радиуса КТ оно смещается в направлении примеси.

Из сравнения рис. 2 и рис. 4 видно, что энергия основного состояния электрона в КТ с двумя примесями, рассчитанная методом теории возмущений, лучше согласуется с результатом вариационного метода, чем соответственные энергии электрона в поле одной примеси.



**Рис. 4.** Зависимость  $E_{10}^{++}$  от положения нецентральной донорной примеси: 1 — вариационный метод; 2 — теория возмущений; 3 — энергия электрона в КТ с центральной примесью ( $E_{10}^+$ ). (а)  $R = 5a_{\text{Cds}}$ ; (б)  $R = 20a_{\text{Cds}}$ .



**Рис. 5.** Распределение плотности вероятности нахождения электрона в КТ с двумя донорными примесями при разных положения нецентральной примеси:  $r_0 = 0,2R, 0,5R, 0,9R, 1,1R$ ;  $R = 5a_{\text{Cds}}$ .

В случае уменьшения  $r_0$  абсолютное значение энергии  $E_{10}^{++}$  увеличивается, и при  $r_0 = 0$ , для больших КТ, как видно из рис. 2, б) и рис. 4, б), справедливо соотношение  $E_{10}^{++} = 4 E_{10}^+$ . Это понятно из физических соображений, поскольку две донорные примеси, расположенные в центре КТ равноценны двукратно ионизированной

примеси, для которой это соотношение следует из общей теории [7]. Если нецентральная примесь расположена далеко за пределами КТ, то  $E_{10}^{++}$  приближается к  $E_{10}^{+}$ .

С распределения плотности вероятности нахождения электрона в КТ CdS/SiO<sub>2</sub> с двумя донорными примесями (рис. 5) видно, что независимо от величины  $r_0$  наиболее вероятным положением электрона является область в центре КТ. Таким образом, взаимодействие электрона с центральной примесью сильнее, чем с нецентральной, а при  $r_0 > 0,5R$  взаимодействие с нецентральной примесью можно рассматривать как возмущение.

## 6. ВЫВОДЫ

Энергии основного состояния электрона в сферической наносистеме CdS/SiO<sub>2</sub> с одной и двумя примесями, рассчитанные вариационным методом в граничных случаях хорошо согласуются с результатами точного решения уравнения Шредингера и теории возмущений. Наличие примесей в КТ существенно влияет не только на энергетический спектр электронов, но и на распределение плотности вероятности их распределения в наносистеме. В случае центральной примеси энергия связи электрона максимальна. Донорные примеси, расположенные вне КТ, слабо влияют на состояние электрона, локализованного глубокой потенциальной ямой квантовой точки. Таким образом, для инжекции свободных электронов в КТ достаточно создание внешних примесных центров. Наличие донорных примесей внутри КТ приводит к низкоэнергетическому сдвигу энергетического спектра электронов.

## ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. V. Holovatsky, O. Makhanets, and O. Voitsekhivska, *Physica E*, **41**: 1522 (2009).
2. S. Yilmaz and H. Safak, *Physica E*, **36**: 40 (2007).
3. В. Бойчук, И. Билинский, Р. Лешко, Я. Вороняк, *УФЖ*, **54**: 1023 (2009).
4. S. Sadeghi, *Physica E*, **41**: 1319 (2009).
5. C. Bose and C. K. Sarkar, *phys. stat. sol. (b)*, **218**: 461 (2000).
6. V. Boichuk, I. Bilynsky, and R. Leshko, *Cond. Mat. Phys.*, **13**: 13702 (2009).
7. I. О. Вакарчук, *Квантова механіка* (Львів: ЛДУ ім. І. Франка: 1998).