

**KHẢO SÁT ĐẶC TRƯNG PHỔ HẤP THỤ CỦA CHẤM LƯỢNG TỬ PHÒNG CẦU**• Hoàng Sỹ Tài<sup>(\*)</sup>**Tóm tắt**

*Trong gần đúng khối lượng hiệu dụng cho điện tử (lỗ trống), trạng thái của chấm lượng tử phòng cầu khi không có trường ngoài và bỏ qua các tương tác và nhiễu loạn được xét trong hệ tọa độ phòng cầu. Trị riêng và hàm riêng của bài toán, thu được sau khi khai triển và tính số trên máy tính cấu hình phổ thông, đã được áp dụng để khảo sát phổ hấp thụ của chấm lượng tử phòng cầu GaAs. Kết quả cho thấy phép tính và thuật toán giải số của tôi có thể thu được phổ năng lượng của chấm lượng tử phòng cầu và phổ hấp thụ của các chấm lượng tử phòng cầu GaAs. Kết quả này sẽ là cơ sở ứng dụng để phát triển bài toán trong những điều kiện phức tạp hơn.*

*Từ khóa: Chấm lượng tử, phòng cầu, phổ hấp thụ, dạng thuần, dạng dẹt.*

**1. Giới thiệu**

Cấu trúc thấp chiều hình thành khi ta hạn chế chuyển động của các điện tử theo ít nhất là một hướng trong phạm vi khoảng cách cỡ bước sóng De Broglie của nó. Khi đó, việc giải phương trình Schrödinger cho thấy số chiều đóng một vai trò quan trọng trong phổ năng lượng của hệ. Tùy theo số chiều, người ta chia vật liệu bán dẫn làm bốn loại: bán dẫn khối, giếng lượng tử (quantum well), dây lượng tử (quantum wire) và các chấm lượng tử (quantum dot – QD). Trong QD các hạt bị giới hạn theo cả 3 chiều trong không gian và không thể chuyển động tự do và vì thế chỉ tồn tại các trạng thái gián đoạn trong không gian. Phổ năng lượng liên tục chuyển thành các mức năng lượng gián đoạn theo cả ba chiều trong không gian.

QD là tinh thể bán dẫn, có kích thước cỡ nm, có thể chứa từ 1-1000 điện tử. Trong QD, các mức năng lượng của hệ bị lượng tử hóa. Thời gian sống phát xạ của QD dài do đó làm tăng xác suất hấp thụ tại các bước sóng ngắn hơn và làm cho phổ hấp thụ mở rộng. Do năng lượng vùng cấm quyết định bước sóng phát xạ photon, bởi vậy có thể kiểm soát bước sóng phát xạ qua kích thước của hạt nano. Phổ hấp thụ rộng của các QD cho phép ta kích thích, tại cùng một bước sóng, kích thích cùng lúc các QD kích thước khác nhau, trong vùng phổ rộng. Nghiên cứu về QD bắt đầu từ năm 1986 và tăng mạnh cho đến nay đã có nhiều đăng ký phát minh cho các ứng dụng của QD. Như trong các linh kiện chuyển đổi năng lượng mặt trời, các linh kiện quang điện tử, các detector siêu nhạy, các linh kiện

phát sáng, trong các ứng dụng y – sinh [5], [6], các cảm biến sinh học nano [7]. Có thể nói, hiện nay là thời đại của QD vì có rất nhiều ứng nổi bật của QD trong các lĩnh vực trên.

Trong bài viết này, chấm lượng tử phòng cầu dạng thuần và dẹt khi không có trường ngoài và bỏ qua các tương tác, nhiễu loạn được xét trên hệ tọa độ phòng cầu trong gần đúng khối lượng hiệu dụng. Việc không tính đến các tương tác và nhiễu loạn như trong một số bài viết [1], [2] cho phép thu được trị riêng và hàm riêng của bài toán bằng tính số trên máy tính cấu hình phổ thông sau khi khai triển. Kết quả thu được được áp dụng để khảo sát phổ hấp thụ của chấm lượng tử phòng cầu dạng thuần và dẹt của một số bán dẫn điển hình

**2. Cơ sở lý thuyết và phương pháp nghiên cứu****2.1. Bài toán biên cho chấm lượng tử phòng cầu dạng thuần và dẹt trong gần đúng khối lượng hiệu dụng**

Trong gần đúng khối lượng hiệu dụng, xét chấm lượng tử phòng cầu (SQD) trong mô hình lượng tử hóa kích thước mạnh. Phương trình Schrödinger của điện tử (lỗ trống) trong từ trường đều  $\vec{H}$  với thế vec tơ  $\vec{A}$  và điện trường  $\vec{e}$  của SQD như sau:

$$\hat{H}\psi(r_e, r_h) = E\psi(r_e, r_h); \quad (2.1)$$

với :

$$\hat{H} = \sum_{i=e,h} \left\{ \frac{1}{2m_i} \left( \hat{P}_i - \frac{q_i}{c} \vec{A} \right)^2 - q_i (\vec{e} \vec{r}_i) + V_{conf}(r_i) - \frac{q_i q_c}{\kappa |\vec{r}_i|} \right\} + \frac{q_e q_h}{\kappa |\vec{r}_e - \vec{r}_h|}. \quad (2.2)$$

Bài toán trên được giải trong phạm vi: SQD không chịu ảnh hưởng của điện trường  $\vec{e}$ , không chịu tác dụng của từ trường  $\vec{H} = 0$  và bỏ qua cả tương tác Coulomb giữa điện tử và lỗ trống cùng với ảnh hưởng của tạp chất.

<sup>(\*)</sup> Trường Đại học Quảng Bình.

Lúc đó, phương trình Schrodinger cho điện tử và lỗ trống có dạng :

$$\hat{H}\psi(r) = E\psi(r) \quad (2.3)$$

với:  $\hat{H} = \frac{1}{2m^*} \hat{P}^2 + V_{conf}(\vec{r})$ ;  $m^*$  là khối lượng hiệu dụng của điện tử (hoặc lỗ trống), còn thế cảm từ  $V_{conf}(\vec{r})$  có dạng:

$$V_{conf}(\vec{r}) = V(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & (0 < S(\vec{r}) < 1) \\ \infty & (S(\vec{r}) \geq 1) \end{cases}, \quad (2.4)$$

với :

$$S(\vec{r}) = \frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{c^2}. \quad (2.5)$$

Ở đây  $a, c$  là các bán trục của SQD. Trong trường hợp chấm lượng tử phỏng cầu dạng thuận (prolate spheroidal quantum dot – PSQD) ta có  $c > a$  và chấm lượng tử phỏng cầu dạng dẹt (oblate spheroidal quantum dot – OSQD) ta có  $c < a$ .

**2.2. Năng lượng và hàm sóng của điện tử trong SQD**

Trong phần này, tôi trình bày cách giải phương trình (2.3) để tìm hàm sóng và phổ năng lượng của một hạt bị giam giữ trong một không gian khép kín với dạng phỏng cầu. Chọn hệ trục tọa độ sao cho bán trục  $a$  của chấm nằm trong mặt phẳng  $Oxy$  còn  $c$  hướng dọc theo trục  $z$ . Miền khảo sát bị giới hạn bởi bề mặt  $S$  với phương trình tham số:

$$\begin{cases} x = a \cos \varphi \sin \theta \\ y = a \sin \varphi \sin \theta, \\ z = c \cos \theta \end{cases} \quad (2.6)$$

với  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$  và  $0 \leq \theta \leq \pi$ . Vấn đề của bài toán là giải phương trình Schrödinger cho hạt tự do:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \Psi(x, y, z) = E^v \Psi(x, y, z), \quad (2.7)$$

với điều kiện biên:

$$\Psi(x, y, z)|_{(x,y,z) \in S} = 0. \quad (2.8)$$

**\* Xét trong PSQD**

Bài toán biên được giải trong hệ tọa độ phỏng cầu dạng thuận  $(\xi, \eta, \varphi)$ :

$$\begin{cases} x = f \sqrt{\xi^2 - 1} \sqrt{1 - \eta^2} \cos \varphi \\ y = f \sqrt{\xi^2 - 1} \sqrt{1 - \eta^2} \sin \varphi, \\ z = f \xi \eta \end{cases} \quad (2.9)$$

với  $1 \leq \xi < +\infty; -1 \leq \eta \leq 1; 0 \leq \varphi \leq 2\pi$ ,  $f$  là hằng số.

Chọn  $\eta = \cos \theta$  với  $0 \leq \theta \leq \pi$ , từ phương trình (2.9) tôi thấy trong hệ tọa độ phỏng cầu, bề mặt với phương trình  $\xi = const$  mô tả cho họ các ellipsoid với bán trục  $f \sqrt{\xi^2 - 1}$  (trong mặt phẳng  $Oxy$ ) và  $f \xi$  (dọc theo trục  $z$ ). Vì vậy, tham số  $f$  được xác định bởi điều kiện là ellipsoid thuộc về họ bề mặt (2.6), nghĩa là, phải tồn tại một giá trị  $\bar{\xi}$  của  $\xi$  sao cho:

$$\begin{cases} f \sqrt{\bar{\xi}^2 - 1} = a \\ f \bar{\xi} = c \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} f = c \sqrt{1 - \frac{1}{\chi^2}} = ce \\ \bar{\xi} = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{1}{\chi^2}}} = \frac{1}{e} \end{cases}. \quad (2.10)$$

Ở đây  $e = \frac{f}{c} = \sqrt{1 - \frac{1}{\chi^2}}$  là tâm sai của ellipsoid. Phương trình (2.10) xác định khi  $\chi = \frac{c}{a} > 1$ . Bây giờ, có thể viết lại và tách biến phương trình (2.7) trong hệ tọa độ mới với  $m$  và  $\lambda$  là hằng số tách,  $h = \varepsilon f = f \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}} E$ , thu được:

$$\frac{d}{d\xi} \left[ (\xi^2 - 1) \frac{d}{d\xi} R(\xi) \right] - \left[ \lambda - h^2 \xi^2 + \frac{m}{\xi^2 - 1} \right] R(\xi) = 0. \quad (2.11a)$$

$$\frac{d}{d\eta} \left[ (1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} S(\eta) \right] + \left[ \lambda - h^2 \eta^2 - \frac{m}{1 - \eta^2} \right] S(\eta) = 0. \quad (2.11b)$$

$$\frac{1}{\phi(\varphi)} \frac{d^2}{d\varphi^2} \phi(\varphi) = -m^2. \quad (2.11c)$$

Chú ý rằng các phương trình (2.11a) và (2.11b) được liên kết bởi cả hằng số tách và  $h$ . Trong trường hợp này, phương trình thứ hai phải được giải với  $h$  cố định và  $\lambda$  rời rạc là hàm của  $h$ .

Nghiệm của (2.11c) có dạng  $\phi(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$

với  $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$  là số lượng tử phương vị. Trong khi đó nghiệm của phương trình (2.11b) có dạng tổ hợp tuyến tính các hàm phồng cầu góc dạng thuần loại một và loại hai [5]:

$$S_{lm}(h, \eta) = C_1 S_{lm}^{(1)}(h, \eta) + C_2 S_{lm}^{(2)}(h, \eta) \quad (2.12)$$

với  $S_{lm}^{(1)}(h, \eta) = \sum_{r=0,1}^{\infty} d_r^{lm}(h) P_{l+r}^l(\eta)$  và  $S_{lm}^{(2)}(h, \eta) = \sum_{r=-\infty}^{\infty} d_r^{lm}(h) Q_{l+r}^l(\eta)$ .

Trong đó  $P_{l+r}^l(\eta)$  và  $Q_{l+r}^l(\eta)$  là các đa thức Legendre liên kết và  $l \geq m$ . Các hàm  $S_{lm}^{(2)}(h, \eta)$  phân kỳ khi  $\eta = 1$ . Vì vậy, để hàm sóng hữu hạn với  $-1 \leq \eta \leq 1$  thì  $C_2 = 0$ .

Các nghiệm của phương trình (2.11a) là tổ hợp tuyến tính của các hàm phồng cầu xuyên tâm dạng thuần loại 1 và loại 2 [5]:

$$R_{lm}(h, \xi) = B_1 R_{lm}^{(1)}(h, \xi) + B_2 R_{lm}^{(2)}(h, \xi). \quad (2.13)$$

Hàm  $R_{lm}^{(2)}(h, \xi)$  phân kỳ tại  $\xi = 1$ . Vì vậy, để hàm sóng hữu hạn khi  $1 \leq \xi \leq \bar{\xi}$  ta phải chọn hệ số  $B_2 = 0$ .

Từ những kết quả trên, tôi tìm được hàm sóng điện tử (lỗ trống) trong một PSQD như sau:

$$\Psi(\xi, \eta, \varphi) = A S_{lm}^{(1)}(h, \eta) R_{lm}^{(1)}(h, \xi) e^{im\varphi}, \quad (2.14)$$

với  $A$  là hệ số chuẩn hóa.

Khi đó điều kiện (2.8) trở thành:

$$R_{l,m}^{(1)}(h, \bar{\xi}) = 0. \quad (2.15)$$

**Xét trong OSQD**

Bài toán biên trong trường hợp này được xét trong hệ tọa độ phồng cầu dạng dẹt sẽ được giải quyết theo trình tự như PSQD. Phương trình (2.7) trong trường hợp này được tách thành:

$$\frac{d}{d\xi} \left[ (\xi^2 + 1) \frac{d}{d\xi} R(\xi) \right] - \left[ \lambda - h^2 \xi^2 - \frac{m}{\xi^2 + 1} \right] R(\xi) = 0, \quad (2.16a)$$

$$\frac{d}{d\eta} \left[ (1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} S(\eta) \right] + \left[ \lambda + h^2 \eta^2 - \frac{m}{1 - \eta^2} \right] S(\eta) = 0, \quad (2.16b)$$

$$\frac{1}{\phi(\varphi)} \frac{d^2}{d\varphi^2} \phi(\varphi) = -m^2. \quad (2.17c)$$

Nghiệm của phương trình (2.16b) có dạng tổ hợp tuyến tính các hàm phồng cầu góc dạng dẹt loại một và loại hai [4]:

$$S_{lm}(-ih, \eta) = C_1 S_{lm}^{(1)}(-ih, \eta) + C_2 S_{lm}^{(2)}(-ih, \eta) \quad (2.18)$$

với  $S_{lm}^{(1)}(-ih, \eta) = \sum_{r=0,1}^{\infty} d_r^{lm}(-ih) P_{l+r}^l(\eta)$  và  $S_{lm}^{(2)}(-ih, \eta) = \sum_{r=-\infty}^{\infty} d_r^{lm}(-ih) Q_{l+r}^l(\eta)$ .

Trong đó  $P_{l+r}^l(\eta)$  và  $Q_{l+r}^l(\eta)$  là các đa thức Legendre liên kết và  $l \geq m$ ;  $C_1, C_2$  là các tham

số;  $d_r^{lm}$  là hệ số khai triển. Các hàm  $S_{lm}^{(2)}(-ih, \eta)$  phân kỳ khi  $\eta = 1$ . Vì vậy, để hàm sóng hữu hạn với  $-1 \leq \eta \leq 1$  thì  $C_2 = 0$ .

Các nghiệm của phương trình (2.16a) là tổ hợp tuyến tính của các hàm phồng cầu xuyên tâm dạng dẹt loại một và loại hai [4]:

$$R_{lm}(-ih, i\xi) = B_1 R_{lm}^{(1)}(-ih, i\xi) + B_2 R_{lm}^{(2)}(-ih, i\xi). \quad (2.19)$$

Ở đây,  $B_1, B_2$  là các hệ số; Các hàm phồng cầu xuyên tâm dạng dẹt có dạng:

$$R_{lm}^{(i)}(h, \xi) = \frac{1}{\sum_{r=0,1}^{\infty} d_r^{lm}(h) \frac{(2l+r)!}{r!}} \left( \frac{\xi^2 - 1}{\xi^2} \right)^{\frac{m}{2}} \sum_{r=0,1}^{\infty} i^{r+l-m} d_r^{lm}(h) \frac{(2l+r)!}{r!} j_{l+r}^{(i)}(h\xi)$$

với  $r$  bắt đầu từ 0 hoặc 1 tương ứng  $l-m$  là chẵn hoặc lẻ.  $j_n^{(i)}$  là hàm Bessel cầu bậc  $i$  cấp  $n$ . Hàm  $R_{lm}^{(2)}(-ih, i\xi)$  phân kỳ tại  $\xi = 1$ . Vì vậy, để hàm sóng hữu hạn khi  $1 \leq \xi \leq \bar{\xi}$  ta phải chọn hệ số  $B_2 = 0$ .

Từ những kết quả trên, tôi tìm được hàm sóng của điện tử (hay lỗ trống) trong một OSQD như sau:

$$\Psi(\xi, \eta, \varphi) = A S_{lm}^{(1)}(-ih, \eta) R_{lm}^{(1)}(-ih, i\xi) e^{im\varphi}, \quad (2.20)$$

với  $A$  là hệ số chuẩn hóa. Khi đó điều kiện (2.8) với OSQD trở thành:

$$R_{l,m}^{(1)}(-ih, \bar{\xi}) = 0. \quad (2.21)$$

Phương trình (2.15) và (2.21) cho phép ta xác định được phổ năng lượng gián đoạn  $\varepsilon^v = \frac{2m^* E^v}{\hbar^2}$  của hạt giam giữ trong PSQD và OSQD. Với mỗi cặp giá trị  $l, m$  xác định và ứng với một giá trị xác định của  $\bar{\xi}$  ta tìm được một tập các giá trị rời rạc của  $h$  và từ đó xác định được phổ năng lượng.

**2.3. Hệ số hấp thụ của SQD**

Vì ở đây chúng ta không đề cập đến hiệu ứng exciton nên hệ số hấp thụ được tính gần đúng theo công thức như sau [3]:

$$K(\omega^{ph}, a, c) = \sum_{v,v'} K_{v,v'}(\omega^{ph}, a, c, u) = A \sum_{v,v'} I_{v,v'}(u) \delta(\hbar\omega^{ph} - W_{v,v'}) \quad (3.1)$$

$$I_{v,v'} = \left| \int \psi_v^e(r, a, c, \mu_e) \psi_{v'}^h(r, a, c, \mu_h) dr \right|^2. \quad (3.2)$$

Trong đó:  $A$  tỉ lệ với bình phương yếu tổ ma trận trong phân tích Bloch;  $\psi_v^e$  và  $\psi_{v'}^h$  là hàm riêng của điện tử (e) và lỗ trống (h);  $E_v^e$  và  $E_{v'}^h$

là trị riêng năng lượng của (e) và (h), phụ thuộc vào các bán trục  $a, c$  và tập hợp các số lượng tử đoạn nhiệt  $\nu = [n, l, m]$  và  $\nu' = [n', l', m']$ , với  $m = -m'$ ;  $E_g$  là bề rộng vùng cấm của bán dẫn khối,  $\omega^{ph}$  là tần số ánh sáng tới,  $W_{\nu, \nu'} = E_g + E_\nu^e(a, c) + E_{\nu'}^h(a, c)$  là năng lượng chuyển tiếp giữa các vùng ứng với giá trị lớn nhất của  $K(\omega^{ph})$ .

Ta viết lại khai triển (3.1) dưới dạng:

$$K(\omega^{ph}, a, c) = AE_g^{-1} \sum_{\nu, \nu'} I_{\nu, \nu'} \delta[f_{\nu, \nu'}(u)]. \quad (3.3)$$

$$f_{\nu, \nu'}^{h \rightarrow e}(u) = \omega_1 - \frac{E_\nu^e(a, c) + E_{\nu'}^h(a, c)}{E_g} = \omega_1 - \frac{\hbar^2}{2\mu_e c^2 E_g} \left[ 1 + \frac{\mu_e}{\mu_h} \right] \varepsilon_\nu. \quad (3.4)$$

Với  $\omega_1 = \frac{\hbar\omega^{ph} - E_g}{E_g}$  là năng lượng quang

học chuyển tiếp giữa các vùng.

Xét các SQD với bán trục được viết lại  $a = u_p \bar{a}$  được xác định bởi thông số ngẫu nhiên  $u$  với hàm phân bố  $P(u)$ . Ở đây ta sử dụng hàm phân bố Lifshits-Slezov [3]:

$$P(u) = \begin{cases} \frac{3^4 e u^2 e^{-\frac{1}{1-2u/3}}}{2^{5/3} (u+3)^{7/3} (\frac{3}{2}-u)^{11/3}} & \text{khi } 0 < u < \frac{3}{2} \\ 0 & \text{khi } u \leq 0 \cup u \geq \frac{3}{2} \end{cases} \quad (3.5)$$

Hệ số hấp thụ  $K^p(\omega^{ph}, a, \bar{c})$  với kích thước khác nhau của bán trục được khai triển như sau:

$$K^p(\omega^{ph}, a, \bar{c}) = \int K(\omega^{ph}, a, \bar{c}, u_p) P(u_p) du_p. \quad (3.6)$$

Ta đưa đến khai triển giải tích của hệ số hấp thụ  $K(\omega^{ph}, a, c)$  của một hệ các QD bán dẫn với phân bố ngẫu nhiên của bán trục:

$$\frac{K(\omega^{ph})}{K_0} = \sum_{\nu, \nu', s} \frac{K_{\nu, \nu'}(\omega^{ph})}{K_0} \quad (3.7)$$

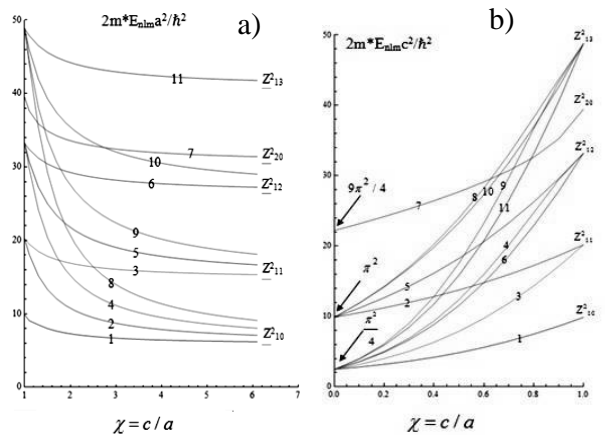
$$\frac{K_{\nu, \nu'}(\omega^{ph})}{K_0} = I_{\nu, \nu'}(u_s) \left| \frac{df_{\nu, \nu'}(u)}{du} \right|_{u=u_s}^{-1} P(u_s).$$

Với  $K_0 = A E_g^{-1}$  là hệ số chuẩn hóa,  $u_s$  là nghiệm của phương trình  $f_{\nu, \nu'}(u_s) = 0$ .

### 3. Kết quả và thảo luận

Sử dụng phần mềm Mathematica chúng tôi thu được đồ thị sự phụ thuộc năng lượng vào

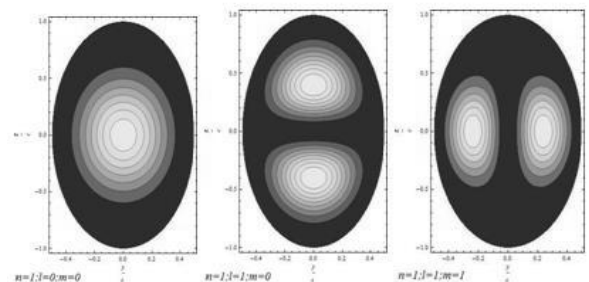
$\chi$  ứng với các bộ giá trị  $(nlm)$  khác nhau như trên Hình 1.



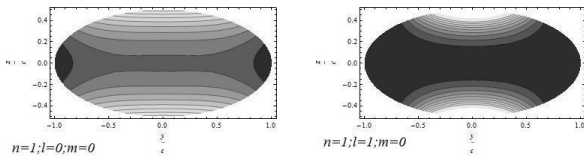
**Hình 1.** Sự phụ thuộc của năng lượng điện tử vào  $\chi$  trong PSQD (a) và OSQD (b), với: (1) 100; (2) 110; (3) 11±1; (4) 120; (5) 12±1; (6) 12±2; (7) 200; (8) 130; (9) 13±1; (10) 13±2; (11) 13±3

Chúng tôi thấy rằng nếu  $\chi > 1$  ở các trạng thái với  $n, m$  giống nhau nhưng  $l$  khác nhau trở thành suy biến gần như nhau với giá trị  $\chi$  lớn. Chúng tôi cũng thấy rằng với  $\chi < 1$  ở các trạng thái với  $n, m$  giống nhau nhưng  $l$  khác nhau trở thành suy biến gần như nhau với giá trị  $\chi$  nhỏ. Các mức năng lượng trong hai phổ khác nhau xuất hiện mức giao cắt, điều này giải thích sự hiện diện của sự suy biến ngẫu nhiên.

Trên Hình 2 và Hình 3 là phân bố xác suất tìm thấy điện tử (lỗ trống) trong SQD ở trong các trạng thái tương ứng với ba bộ số lượng tử  $(nlm)$  khác nhau được chúng tôi lựa chọn.

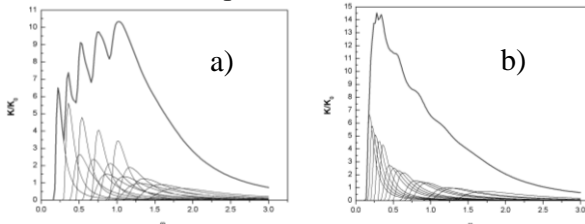


**Hình 2.** Đồ thị mật độ xác suất tìm thấy hạt trong PSQD khi  $\chi = 2$  và  $(n, l, m)$  lần lượt là  $(1, 0, 0)$ ,  $(1, 1, 0)$ ,  $(1, 1, 1)$



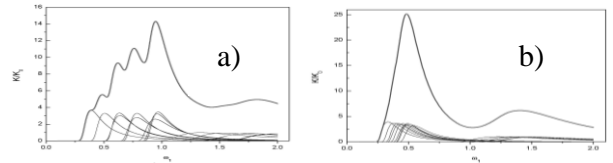
**Hình 3. Đồ thị mật độ xác suất tìm thấy hạt trong OSQD khi  $\chi = 2$  và  $(n,l,m)$  lần lượt là  $(1,0,0), (1,1,0)$**

Thực hiện tính số bằng chương trình lập trình trên phần mềm Mathematica với các hằng số của GaAs:  $\mu_e = 0,067m_0$  và  $\mu_h \equiv \mu_{hh} = 0,558m_0$  lần lượt là khối lượng của điện tử và lỗ trống,  $E_g = 1430$  meV là bề rộng vùng cấm,  $a_B = 104 \times 10^{-10}$  m là bán kính Bohr exciton của một cặp điện tử - lỗ trống.



**Hình 4. Phổ hấp thụ của PSQD GaAs với  $\chi = 2$  (a) và  $\chi = 5$  (b);  $a = 2a_B$  lấy tổng các số lượng tử đầu tiên ( $n = 1; l = 0, 1, 2, \dots; m = 0, 1, \dots, l$ )**

Chúng tôi đưa ra hai đồ thị của hai giá trị  $\chi$  khác nhau để có thể so sánh các giá trị cực đại cũng như sự biến thiên của hệ số hấp thụ trên PSQD. Đường màu đỏ cao nhất trên đồ thị mô tả hệ số hấp thụ toàn phần và các đường màu xanh còn lại phía dưới tương ứng là hệ số hấp thụ riêng phần lấy theo một tập hợp các số lượng tử xác định. Chúng tôi thấy hệ số hấp thụ toàn phần của PSQD GaAs trong trường hợp  $\chi = 2$  có độ lớn thấp hơn và chiều biến thiên diễn ra ít trơn hơn so với hệ số hấp thụ toàn phần trong trường hợp  $\chi = 5$  thể hiện ở Hình 4.



**Hình 5. Phổ hấp thụ của OSQD GaAs với  $\chi = 0,2$  (a) và  $\chi = 0,1$  (b);  $c = a_B$  lấy tổng các số lượng tử đầu tiên ( $n = 1; l = 0, 1, 2, \dots; m = 0, 1, \dots, l$ )**

Chúng tôi cũng thấy hệ số hấp thụ toàn phần của OSQD GaAs trong trường hợp  $\chi = 0,2$  có độ lớn thấp hơn và chiều biến thiên diễn ra ít trơn hơn so với hệ số hấp thụ toàn phần trong trường hợp  $\chi = 0,1$  thể hiện ở Hình 5. Trong tương lai, phép tính và thuật toán giải số của chúng tôi trên đây sẽ là cơ sở ứng dụng để có thể phát triển bài toán trên trong những điều kiện phức tạp hơn như có kết hợp thêm việc khảo sát các hiệu ứng exciton cũng như tương tác giữa điện tử với điện tử và lỗ trống với lỗ trống, hay thay cho các thế giam giữ khác thế vô hạn...

**4. Kết luận**

Chúng tôi đã tìm được hàm sóng và các mức năng lượng của điện tử (lỗ trống) trong PSQD và OSQD, xây dựng được đồ thị biểu diễn sự phụ thuộc của các mức năng lượng của điện tử và mật độ xác suất tìm thấy điện tử trong SQD và ứng với một số các giá trị khác nhau của  $\chi$ . Sử dụng hàm phân bố Lifshits-Slezov chúng tôi đã xác định được biểu thức giải tích của hệ số hấp thụ. Chúng tôi đã tính số và vẽ đồ thị của phổ hấp thụ của một hệ PSQD GaAs và OSQD GaAs ứng với các giá trị khác nhau của  $\chi$ . Kết quả này là một đóng góp vào việc tìm hiểu các hệ thấp chiều trong chất rắn nói chung và bán dẫn nói riêng. Từ đó biết được đặc điểm của vật liệu nano và đi đến các ứng dụng cụ thể trong thực tế./.

**Tài liệu tham khảo**

[1]. G. Cantele, D. Ninno & G. Iadonisi (2000), “Confined states in ellipsoidal quantum dots”, *Journal of Physics: Condensed Matter*, (42), pp. 9019–9036.  
 [2]. A. A Gusev, L. L. Hai, S. I. Vinitsky, O. Chuluunbaatar, V. L. Derbov, A. S. Klombotskaya, K. G. Dvovyan & H. A. Sarkisyan (2013), “Analytical and numerical calculations of spectral and optical characteristics of spheroidal quantum dots”, *Physics of Atomic Nuclei*, (8), pp. 1033-1055.  
 [3]. I. M. Lifshits and V. V. Slezov (1958), *Sov. Phys., JETP.*, (35), 479.  
 [4]. Le-Wei Li, Xiao-Kang Kang & Mook-Seng Leong (2002), *Spheroidal Wave Functions in Electromagnetic Theory*, Wiley, New York.

[5]. Mahto S. K., Park C., Yoon T. H. & Rhee S. W. (2010), “Assessment of cytocompatibility of surface-modified CdSe/ZnSe quantum dots for BALB/3T3 fibroblast cells”, *Toxicology in Vitro*, (24), pp. 1070-1077.

[6]. Smith A. M., Mohs A. M. & Nie S. (2009), “Tuning the optical and electronic properties of colloidal nanocrystals by lattice strain”, *Nature Nanotechnology*, (4), pp. 56-63.

[7]. Smith A. M. & Nie S. (2009), “Semiconductor Nanocrystals: Structure, Properties, and Band Gap Engineering”, *Accounts of Chemical Research*, (43), pp. 190-200.

## INVESTIGATING THE ABSORPTION SPECTRUM OF SPHEROIDAL QUANTUM DOT

### Summary

In the effective mass approximation for the electrons (holes), when there is no external field, with interaction and perturbations neglected, the state of prolate and oblate spheroidal quantum dots are considered in the prolate spheroidal coordinate system. The eigenvalues and eigenfunctions of the problem, obtained after being conducted on ordinary PC configurations, have been applied to investigate the absorption spectrum of spheroidal quantum dots GaAs. The results show that these calculations and numerical algorithms can obtain the energy spectra of the spheroidal quantum dots and the absorption spectra of the GaAs spheroidal quantum dots. Thus, the results make ways for the above problem in more complex conditions.

**Keywords:** Quantum dot, spheroidal, absorption spectrum, prolate, oblate.

*Ngày nhận bài: 09/8/2019; Ngày nhận lại: 28/10/2019; Ngày duyệt đăng: 05/12/2019.*