

# РЕШЕНИЕ ЧАСТИЧНОЙ СПЕКТРАЛЬНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО ОПЕРАТОРА СПЕЦИАЛЬНОГО ВИДА ВАРИАЦИОННЫМ МЕТОДОМ РИТЦА

Н. В. Королев

*ВУНЦ ВВС «ВВА им. проф. Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина»,  
Воронежский государственный университет*

Поступила в редакцию 09.01.2019 г.

**Аннотация.** В рамках вариационного метода Ритца рассчитаны первое собственное значение и собственная функция для эллиптического оператора Гамильтона с параболическим потенциалом, которые характеризуют основное состояние электрона  $e^-$  в поле произвольно расположенного положительно заряженного центра  $d^+$  внутри модельной области в форме шара. Рассчитана энергия связи  $e^- - d^+$  и показано ее изменение при вариации размера модельной области. На примере сферических наночастиц GaAs и CdS установлено, что при смещении положительного заряда от центра к поверхности энергия связи уменьшается на величину порядка 25 и 20%, соответственно.

**Ключевые слова:** собственные значения, собственные функции, метод Ритца.

## SOLUTION OF A PARTIAL SPECTRAL PROBLEM FOR ELLIPTIC OPERATOR OF THE SPECIAL KIND BY VARIATION RITZ METHOD

N. V. Korolev

**Abstract.** In this work, the first eigenvalue and eigenfunction for the elliptic Hamilton operator with a parabolic potential are calculated by the variational Ritz method. This eigenvalue determines the energy of the electron ground state  $e^-$  in the field of an arbitrarily located positively charged center  $d^+$  inside the spherical model domain. The bond energy  $e^- - d^+$  is calculated and its change with variation in the size of the model region and the position of the charged center are shown for GaAs and CdS nanoparticles. It is found that the displacement of the positive charge leads to 25 and 20% reduction of the binding energy, respectively.

**Keywords:** eigenvalues, eigenfunctions, Ritz method.

## ВВЕДЕНИЕ

Исследования процессов взаимодействия излучения с полупроводниковыми квантовыми системами, такими как наночастицы или подобные им системы и комплексы с дискретным спектром [1], остаются актуальными на протяжении длительного времени. Это обусловлено их потенциалом в области построения оптических устройств [2], [3] и развитием люминесцентных методов исследования в биологии и медицине (например, синтез маркеров для визуализации внутриклеточных процессов или путей переноса органических соединений) [3], [4]. Для понимания процесса релаксации возбуждения в таких системах необходимо знать энергии уровней примесных центров, причем для различных размеров исследуемых систем, что определяет актуальность разработки соответствующих математических моделей.

При разработке подобных моделей приходится сталкиваться с проблемой решения спектральной задачи для эллиптических операторов второго порядка. С практической точки зрения, как правило, интерес представляет частичная проблема собственных значений. Для ее решения широко используются методы теории возмущений и вариационные методы. В случаях, когда из физических соображений возможен подбор пробной функции, оптимальным является прямой вариационный метод Ритца [5].

В данной работе проводится вычисление первого собственного значения и собственной функции для эллиптического оператора Гамильтона специального вида в рамках вариационного метода Ритца, а также проводится численный анализ изменения собственного значения в зависимости от параметров задачи.

## 1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассматривается спектральная задача для эллиптического оператора Гамильтона  $\hat{H}$  в модельной области (МО) в виде шара  $\Omega = \{(r, \theta, \varphi) \in \mathbb{R}^3 : 0 \leq r < \infty, 0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \varphi \leq 2\pi\}$  с центром в начале координат:

$$\hat{H}\psi \equiv -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2\psi + \left(\frac{m^*\omega^2 r^2}{2} - \frac{q^2}{\varepsilon|\vec{r} - \vec{r}_0|}\right)\psi = E\psi. \quad (1)$$

Уравнение (1) характеризует спектр электрона с эффективной массой  $m^*$  в поле положительного точечного заряда ( $+q$ ), где конфаймент системы задается параболическим потенциалом. Здесь  $\nabla^2$  – оператор Лапласа в сферической системе координат,  $\varepsilon$  – диэлектрическая проницаемость среды,  $\hbar$  – приведенная постоянная Планка,  $\vec{r}_0$  – радиус-вектор положительного заряда.

Требуется вычислить первое собственное значение (СЗ) и соответствующую собственную функцию (СФ) с помощью прямого вариационного метода Ритца. Для этого необходимо установить вид функционала

$$J(\lambda) = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\int_{\Omega} \psi^*(\vec{r}, \vec{r}_0, \lambda) \hat{H} \psi(\vec{r}, \vec{r}_0, \lambda) d\vec{r}}{\int_{\Omega} \psi^*(\vec{r}, \vec{r}_0, \lambda) \psi(\vec{r}, \vec{r}_0, \lambda) d\vec{r}}, \quad (2)$$

при заданной пробной функции  $\psi(\vec{r}, \vec{r}_0, \lambda)$  и определить оптимальное значение вариационного параметра  $\lambda = \lambda_0$  из необходимого условия его экстремума  $J'_\lambda = 0$ .

## 2. ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНЫЙ СЛУЧАЙ

Рассмотрим частный случай  $r_0 = 0$ , в котором задача соответствует движению электрона в центрально-симметричном поле положительного заряда и допускает относительно простое решение. Для этого с учетом симметрии задачи, условий ограниченности функции в точке  $r = 0$  и отсутствия узловых точек, а также требования  $\psi \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow \infty$ , выберем следующую пробную функцию:

$$\psi(\vec{r}, \vec{r}_0, \lambda) \equiv \psi(r, \lambda) = N_\lambda e^{-\beta r^2/2} e^{-\lambda r}, \quad \langle \psi | \psi \rangle = 1, \quad (3)$$

где  $\beta = m^*\omega/\hbar$  – положительная константа, соотношение для которой следует из вариационной задачи для гармонического осциллятора с частотой  $\omega$  в сферической системе координат [6];  $N_\lambda$  – нормировочная постоянная. Для интегральных выражений использованы обозначения Дирака [6].

Функционал (2) можно представить в виде суммы средних значений кинетической энергии, потенциала конфайнмента и энергии кулоновского взаимодействия:

$$J(\lambda) = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{U}_p | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{U}_c | \psi \rangle. \quad (4)$$

Выражение для среднего значения кинетической энергии записывается в виде

$$T = \langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \langle \psi | \nabla^2 | \psi \rangle = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\beta - \lambda^2) - \frac{\pi \hbar^2 N^2}{2m^* \sqrt{\beta}} \left( \frac{\lambda}{2\sqrt{\beta}} \left( \frac{\lambda^2}{\beta} - \frac{5}{2} \right) + \sqrt{\pi} \left( \frac{3}{2} + \frac{4\lambda^2}{\beta} - \frac{2\lambda^4}{\beta^2} \right) e^{\lambda^2/\beta} \operatorname{erfc} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{\beta}} \right) \right),$$

в котором использована добавочная функция ошибок [7]

$$\operatorname{erfc}(z) = 1 - \operatorname{erf}(z) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt. \quad (5)$$

Среднее значение потенциальной энергии, с учетом явного вида параметра  $\beta$ , выражается подобным образом

$$U = \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m^*} \langle \psi | r^2 | \psi \rangle = \frac{\pi \hbar^2 N^2}{m^* \sqrt{\beta}} \left( \sqrt{\pi} \left( \frac{3}{4} + \frac{3\lambda^2}{\beta} + \frac{\lambda^4}{\beta^2} \right) e^{\lambda^2/\beta} \operatorname{erfc} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{\beta}} \right) - \frac{\lambda}{\sqrt{\beta}} \left( \frac{5}{2} + \frac{\lambda^2}{\beta} \right) \right).$$

Энергия кулоновского взаимодействия описывается интегральным выражением

$$U_{co} = \langle \psi | \hat{U}_c | \psi \rangle = -\frac{2\pi N^2 q^2}{\beta \varepsilon} \left( 1 - \frac{\lambda \sqrt{\pi}}{\sqrt{\beta}} e^{\lambda^2/\beta} \operatorname{erfc} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{\beta}} \right) \right).$$

В результате функционал (4) примет вид

$$J(\lambda) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\beta - \lambda^2) + \frac{4\pi N^2 \hbar^2}{2m^*} \frac{\lambda^2}{\beta^{3/2}} \left( \sqrt{\pi} \left( \frac{1}{2} + \frac{\lambda^2}{\beta} \right) e^{\lambda^2/\beta} \operatorname{erfc} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{\beta}} \right) - \frac{\lambda}{\sqrt{\beta}} \right) - \frac{4\pi N^2 q^2}{2\beta \varepsilon} \left( 1 - \frac{\lambda \sqrt{\pi}}{\sqrt{\beta}} e^{\lambda^2/\beta} \operatorname{erfc} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{\beta}} \right) \right), \quad (6)$$

где квадрат постоянной нормировки

$$N^2 = \frac{1}{4\pi} \left( \frac{1}{2\beta^{3/2}} \left( -\frac{\lambda}{\sqrt{\beta}} + \sqrt{\pi} \left( \frac{1}{2} + \frac{\lambda^2}{\beta} \right) e^{\lambda^2/\beta} \operatorname{erfc} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{\beta}} \right) \right) \right)^{-1}. \quad (7)$$

Введем обозначения

$$I_{02}^0 = \frac{1}{2\beta} \left( 1 - \frac{\lambda \sqrt{\pi}}{\sqrt{\beta}} e^{\lambda^2/\beta} \operatorname{erfc} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{\beta}} \right) \right), \quad (8)$$

$$I_{03}^0 = \frac{1}{2\beta} \left( 1 + \frac{\lambda^2}{\beta} - \frac{\lambda \sqrt{\pi}}{\sqrt{\beta}} \left( \frac{3}{2} + \frac{\lambda^2}{\beta} \right) e^{\lambda^2/\beta} \operatorname{erfc} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{\beta}} \right) \right), \quad (9)$$

$$\frac{1}{\lambda} (I_{02}^0 - I_{03}^0) = \frac{1}{2\beta^{3/2}} \left( -\frac{\lambda}{\sqrt{\beta}} + \sqrt{\pi} \left( \frac{1}{2} + \frac{\lambda^2}{\beta} \right) e^{\lambda^2/\beta} \operatorname{erfc} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{\beta}} \right) \right) = I_{06}^0, \quad (10)$$

с помощью которых (6) и (7) сводятся к компактному виду

$$J(\lambda) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\beta + \lambda^2) - \frac{q^2 I_{02}^0}{\varepsilon I_{06}^0}, \quad N^2 = \frac{1}{4\pi I_{06}^0}. \quad (11)$$

Из условия экстремума  $J'_\lambda = 0$  следует трансцендентное уравнение на вариационный параметр  $\lambda$ :

$$\lambda (2\beta I_{06}^0)^2 + \frac{q^2 m^*}{\varepsilon \hbar^2 \beta} \left( 1 - 6\beta I_{02}^0 + \pi \left( \frac{1}{2} - \frac{\lambda^2}{\beta} \right) e^{2\lambda^2/\beta} \operatorname{erfc}^2 \left( \frac{\lambda}{\sqrt{\beta}} \right) \right) = 0. \quad (12)$$

Таким образом, функционал для вариационной задачи (1) и (2) с пробной функцией (3) и обозначениями (8)–(10) записывается в виде (11), а уравнение на вариационный параметр имеет вид (12). СЗ определяется как  $E_0 = J(\lambda_0)$ .

Отметим, что решение спектральной задачи (1)–(2) с пробной функцией (3) может быть получено путем сведения трехмерного уравнения (1) к одномерному уравнению движения вдоль радиальной координаты  $r$  на промежутке  $r \geq 0$ . При этом в получаемом уравнении возникает слагаемое, отвечающее за центробежное отталкивание зарядов. Данный прием основан на методе разделения переменных, который в случае произвольного расположения положительно заряженного центра не применим.

### 3. ПРОИЗВОЛЬНОЕ РАСПОЛОЖЕНИЕ ПОЛОЖИТЕЛЬНОГО ЗАРЯДА

В случае произвольного расположения заряженного центра в пробной функции (3) меняется экспоненциальный множитель с вариационным параметром:

$$\psi(\vec{r}, \vec{r}_0, \lambda) = N_\lambda e^{-\beta r^2/2} e^{-\lambda|\vec{r}-\vec{r}_0|}.$$

Для модуля разности двух векторов из разложения в ряд Тейлора в первом приближении справедливо представление

$$|\vec{r} - \vec{r}_0| = \sqrt{r^2 - 2rr_0 \cos \theta + r_0^2} = r_> \sqrt{1 + \left( \frac{r_<}{r_>} \right)^2 - 2 \left( \frac{r_<}{r_>} \right) \cos \theta} \approx r_> - r_< \cos \theta.$$

где  $r_<$  и  $r_>$  – наименьшая и наибольшая длины векторов, соответственно. В таком приближении пробная функция принимает вид

$$\psi(\vec{r}, \vec{r}_0, \lambda) \equiv \psi(r, r_0, \theta, \lambda) = \begin{cases} N_\lambda e^{-\beta r^2/2} e^{-\lambda(r_0 - r \cos \theta)}, & r_0 \geq r, \\ N_\lambda e^{-\beta r^2/2} e^{-\lambda(r - r_0 \cos \theta)}, & r > r_0. \end{cases} \quad (13)$$

Получим явный вид для среднего значения оператора кинетической энергии. Для этого, применяя оператор Лапласа к пробной функции и группируя слагаемые с учетом условия нормировки  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ , имеем

$$T = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\beta - \lambda^2) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \langle \psi | r^2 \beta^2 | \psi \rangle - \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[ \langle \psi | -2r\beta\lambda \cos \theta | \psi \rangle_{r < r_0} + \langle \psi | 2r\beta\lambda - \frac{2\lambda}{r} - \frac{2r_0\lambda \cos \theta}{r^2} + \frac{r_0^2 \lambda^2 \sin^2 \theta}{r^2} | \psi \rangle_{r > r_0} \right].$$

Аналогично, среднее значение потенциальной энергии есть

$$U = \frac{\hbar^2}{2m^*} \langle \psi | r^2 \beta^2 | \psi \rangle_{r < r_0} + \frac{\hbar^2}{2m^*} \langle \psi | r^2 \beta^2 | \psi \rangle_{r > r_0} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \langle \psi | r^2 \beta^2 | \psi \rangle.$$

При вычислении среднего значения энергии кулоновского взаимодействия необходимо использовать разложение по сферическим функциям  $Y_{ls}(\theta, \varphi)$  [8]

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{s=-l}^l Y_{ls}^*(\theta', \varphi') Y_{ls}(\theta, \varphi). \quad (14)$$

В случае основного состояния  $l = s = 0$  от суммы (14) остается одно слагаемое  $r_{>}^{-1}$ , а значит

$$U_{co} = \langle \psi | -\frac{q^2}{\varepsilon|\vec{r}-\vec{r}_0|} | \psi \rangle = -\frac{q^2}{\varepsilon} \left( \langle \psi | \frac{1}{r_0} | \psi \rangle_{r < r_0} + \langle \psi | \frac{1}{r} | \psi \rangle_{r > r_0} \right).$$

После интегрирования по угловым переменным  $(\theta, \varphi)$  в выражении для функционала  $J(\lambda)$  будут содержаться следующие интегралы по радиальной переменной:

$$I_{01} = \frac{\lambda r_0}{\sinh(2\lambda r_0)} \mathcal{K}_0, \quad I_{02} = \mathcal{K}_1, \quad I_{03} = \beta \mathcal{K}_3, \quad I_{06} = \mathcal{K}_2, \quad (15)$$

$$I_{04} = e^{-2\lambda r_0} \int_0^{r_0} r^2 e^{-\beta r^2} \cosh(2\lambda r) dr, \quad I_{05} = e^{-2\lambda r_0} \int_0^{r_0} r^2 e^{-\beta r^2} \frac{\sinh(2\lambda r)}{2\lambda r} dr, \quad (16)$$

$$\mathcal{K}_j = \frac{\sinh(2\lambda r_0)}{2\lambda r_0} \int_{r_0}^{\infty} r^j e^{-\beta r^2 - 2\lambda r} dr, \quad j = \overline{0, 3}.$$

Применяя указанные обозначения, запишем требуемый функционал в виде

$$J(\lambda) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\beta - \lambda^2) + \frac{\hbar^2}{2m^*} 4\pi N^2 [2\lambda (I_{02} - I_{03}) + \zeta(\lambda, r_0) I_{01} + \beta (I_{04} - I_{05})] - \\ - 4\pi N^2 \frac{q^2}{\varepsilon} \left( \frac{1}{r_0} I_{05} + I_{02} \right), \quad 4\pi N^2 = (I_{05} + I_{06})^{-1}, \quad (17)$$

где  $\zeta(\lambda, r) = \cosh(2\lambda r) - \sinh(2\lambda r)/(2r\lambda)$ , причем  $\lim_{r \rightarrow 0} \zeta(\lambda, r) = 0$ .

Введенные интегралы (15), как и (8)–(10), выражаются через дополнительную функцию ошибок  $\operatorname{erfc}(t)$  (5):

$$I_{01} = \frac{\sqrt{\pi}}{4\sqrt{\beta}} \mathcal{V}(\lambda, r_0), \quad \mathcal{V}(\lambda, r_0) = e^{\lambda^2/\beta} \operatorname{erfc}\left(\frac{r_0\beta + \lambda}{\sqrt{\beta}}\right), \quad (18)$$

$$I_{02} = \frac{\sinh(2\lambda r_0)}{2\lambda r_0} \frac{1}{2\beta} \left( e^{-\beta r_0^2 - 2\lambda r_0} - \frac{\lambda\sqrt{\pi}}{\sqrt{\beta}} \mathcal{V}(\lambda, r_0) \right), \quad (19)$$

$$I_{03} = \frac{\sinh(2\lambda r_0)}{4\beta\lambda r_0} \left( e^{-\beta r_0^2 - 2\lambda r_0} \left( 1 - \lambda r_0 + \beta r_0^2 + \frac{\lambda^2}{\beta} \right) - \frac{\lambda\sqrt{\pi}}{\sqrt{\beta}} \left( \frac{3}{2} + \frac{\lambda^2}{\beta} \right) \mathcal{V}(\lambda, r_0) \right), \quad (20)$$

$$I_{06} = \frac{\sinh(2\lambda r_0)}{2\lambda r_0} \frac{1}{2\beta^{3/2}} \left( \frac{r_0\beta - \lambda}{\sqrt{\beta}} e^{-\beta r_0^2 - 2\lambda r_0} + \sqrt{\pi} \left( \frac{1}{2} + \frac{\lambda^2}{\beta} \right) \mathcal{V}(\lambda, r_0) \right), \quad (21)$$

а значения интегралов (16) находятся численно. Данная форма записи решения вариационной задачи позволяет легко проверить предельный переход от случая произвольного положения заряженного центра к частному случаю при  $r_0 = 0$ .

Таким образом, функционал для вариационной задачи (1)–(2) с пробной функцией (13) и обозначениями (16), (18)–(21) имеет вид (17). Уравнение на вариационный параметр имеет громоздкий вид и здесь не приводится. Соответствующая собственному значению  $E_0 = J(\lambda_0)$  СФ  $\psi(\vec{r}, \vec{r}_0, \lambda_0)$  задается выражением (13).

#### 4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Численный анализ проводился для материалов GaAs и CdS. Используемые параметры представлены в таблице 1. На практике интерес представляет не само СЗ  $J(\lambda_0)$ , а энергия связи  $E_b = \mathcal{E} - J(\lambda_0)$ , определяемая как разница между СЗ задачи (1) без заряженного центра

в МО  $\mathcal{E} = 3\beta\hbar^2/(2m^*)$  и полученным СЗ. Размерные зависимости, т.е. кривые изменения  $E_b$  как функции размера МО  $\beta^{-1/2}$ , [см], представлены на рисунке 1 в безразмерных единицах: энергия через отношение к эффективному Ридбергу  $Ry^* = m^*e^4/(2\hbar^2\varepsilon)$ , а размер МО через отношение к борновскому радиусу  $a_0 = \hbar^2\varepsilon/(m^*e^2)$ :  $\rho = \beta^{-1/2}/a_0$ . Видно, что увеличение размера МО  $\rho$  ожидается приводит к снижению энергии связи  $E_b$ . Для GaAs на промежутке  $\rho \in [0.15, 1.0]$  энергия связи уменьшается от 17 до 3  $Ry^*$ , а в случае CdS от 23 до 5  $Ry^*$  для  $\rho \in [0.45, 1.0]$ . При смещении заряженного центра ( $r_0 = 1$  и 2 нм для GaAs, 0.5 и 1 нм для CdS) от центра МО к ее границе энергия связи уменьшается, что наиболее заметно при  $\rho \lesssim 0.3$  (GaAs) и  $\rho \lesssim 0.7$  (CdS). Абсолютные значения  $E_b$  представлены на правой шкале графиков.

Таблица 1. Параметры материалов, используемые при численном моделировании

Материал	$m^*/m_0$	$\varepsilon$	$a_0$ , nm	$Ry$ , meV
GaAs [9]	0.067	13.18	10.4	5.24
CdS [10], [11]	0.195	7.06	$\sim 2.0$	52.78

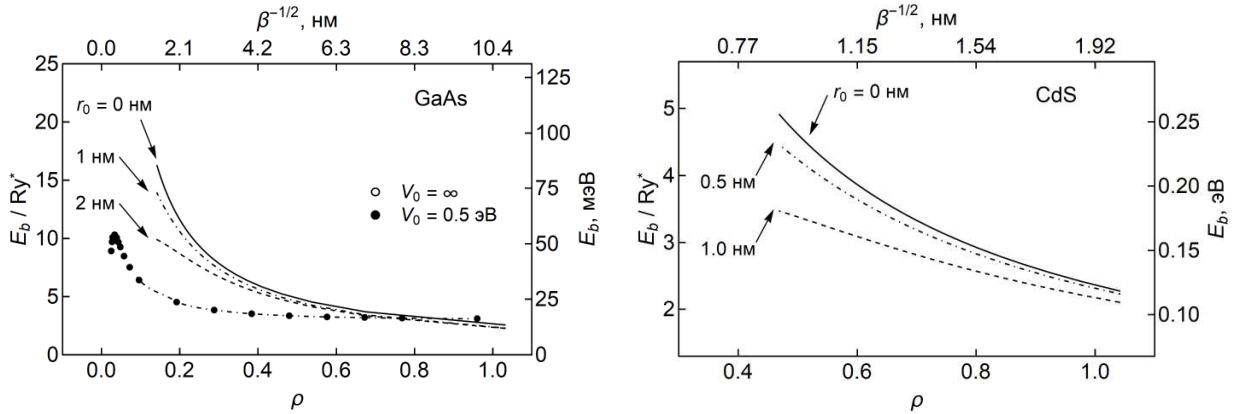


Рис. 1. Энергия связи  $E_b/Ry^*$  как функция размера модельной области  $\rho$ .

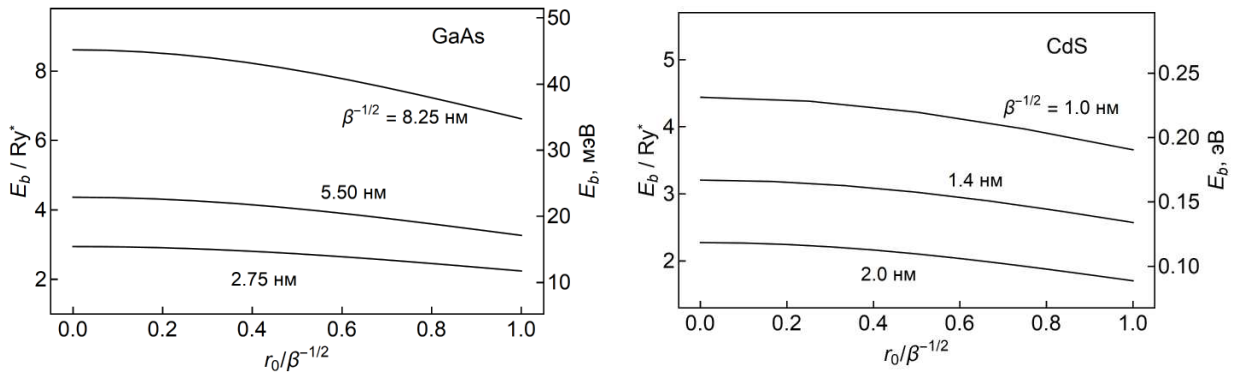


Рис. 2. Энергия связи  $E_b/Ry^*$  как функция положения заряженного центра  $r_0/\beta^{-1/2}$  в модельной области фиксированного размера.

На рисунке 1 (слева) для GaAs также представлены значения энергии связи, полученные в рамках модели сферической прямоугольной потенциальной ямы для  $r_0 = 0$  [12], где вместо параболического потенциала выбрана ступенчатая функция  $V(r) = 0$  при  $r \leq R$  и  $V_0$  при  $r > R$ . Здесь  $R$  – размер модельной области, а  $V_0$  принимается фиксированным (0.5 эВ), либо  $V_0 \rightarrow \infty$ . Оказывается, что полученные значения энергии связи в модели с параболическим потенциалом дают приблизительно среднее значение для двух указанных случаев  $V_0$  в об-

ласти малых  $\rho$ , а с ростом  $\rho$  приближенно совпадает со значением для потенциальной ямы конечной глубины.

Графики изменения энергии связи  $E_b/Ry^*$  при смещении примеси от центра к поверхности для фиксированного размера МО представлены на рисунке 2. Характер зависимостей остается аналогичным для двух материалов и указывает на монотонное уменьшение энергии связи при смещении положительного заряда от центра к границе МО на 23 – 25% и 17 – 24% для GaAs и CdS, соответственно. Энергия связи достигает максимума в случае  $r_0 = 0$ .

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье с помощью вариационного метода Ритца рассчитано первое собственное значение  $J(\lambda_0)$  и собственная функция для эллиптического оператора Гамильтона специального вида. На их основе количественно показано уменьшение энергии связи электрона и положительно заряженного центра  $E_b = \mathcal{E} - J(\lambda_0)$  с увеличением размера модельной области. Для GaAs и CdS установлено, что смещение заряженного центра от центра модельной области к ее поверхности приводит к уменьшению энергии связи на величину порядка 25% (GaAs) и 20% (CdS).

Разработанная модель может использоваться для оценки энергии примесных локальных состояний донорного типа в полупроводниковых наночастицах, для которых характерен донорно-акцепторный механизм люминесценции.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gavrilenko, V. I. Optics of Nanomaterials / V. I. Gavrilenko. — Singapore : Pan Stanford Publishing, 2011. — 326 p.
2. Review — Quantum dots and their application in lighting, displays, and biology / T. Frecker et. al. // Journal of Solid State Science and Technology. — 2016. — Т. 5, № 1. — P. R3019–R3031.
3. Zhou, W. Semiconductor quantum dots / W. Zhou, J. J. Coleman // Current Opinion in Solid State and Materials Science. — 2016. — Т. 20, № 6. — С. 352–360.
4. Semiconducting quantum dots: Modification and applications in biomedical science / L. Wang et. al. // Science China Materials. — 2020. — Т. 63. — С. 1631–1650.
5. Михлин, С. Г. Вариационные методы в математической физике / С. Г. Михлин. — М. : Наука, 1970. — 512 с.
6. Давыдов, А. С. Квантовая механика / А. С. Давыдов. — СПб : БВХ-Петербург, 2011. — 704 с.
7. NIST Handbook of Mathematical Functions / F. W. J. Olver et. al. — Cambridge : Cambridge University Press. — 2010. — 951 p.
8. Никифоров, А. Ф. Специальные функции математической физики / А. Ф. Никифоров, В. Б. Уваров. — М. : Наука, 1984. — 344 с.
9. Adachi, S. GaAs, AlAs, and AlxGa1-xAs@B: Material parameters for use in research and device applications / S. Adachi // Journal of Applied Physics. — 1985. — Т. 58, № 3. — P. R1–R29.
10. Energy structure and absorption spectra of colloidal CdS nanocrystals in gelatin matrix / N. V. Korolev et. al. // Physica E. — 2015. — V. 68. — P. 159–163.
11. Tomasulo, A. Quantum confinement effects in semiconductor clusters. II / A. Tomasulo, M. V. Ramakrishna // Journal of Chemistry Physics. — 1996. — V. 105, № 9. — С. 3612–3626.
12. Porras-Montenegro, N. Hydrogenic impurities in GaAs-(Ga,Al)As quantum dots / N. Porras-Montenegro, S. T. Perez-Merchancano // Physical Review B. — 1992. — V. 46, № 5. — P. 9780–9783.
13. Шабров, С. А. Адаптация метода конечных элементов для математической модели с негладкими решениями / С. А. Шабров // Вестн. Воронеж. гос. ун-та. Сер. Физика, математика. — 2016. — № 2. — С. 153–164.

14. Зверева, М. Б. Об адаптации метода конечных элементов для решения граничной задачи с дифференциалами Стильтьеса на геометрическом графе / М. Б. Зверева, С. А. Шабров, Е. В. Лылов // Вестн. Воронеж. гос. ун-та. Сер. Физика, математика. — 2014. — № 1. — С. 97–105.
15. Зверева, М. Б. Об адаптации метода конечных элементов для задачи с разрывными решениями / М. Б. Зверева, С. А. Шабров, Ж. О. Залукаева // Вестн. Воронеж. гос. ун-та. Сер. Физика, математика. — 2016. — № 4. — С. 112–120.
16. Об априорных оценках решений граничных задач для одного класса вырождающихся псевдодифференциальных уравнений / А. Д. Баев и др. // Вестн. Воронеж. гос. ун-та. Сер. Физика, математика. — 2018. — № 2. — С. 77–92.
17. Баев, А. Д. О некоторых свойствах одного класса псевдодифференциальных операторов с вырождением / А. Д. Баев, П. А. Кобылинский // Вестн. Воронеж. гос. ун-та. Сер. Физика, математика. — 2014. — № 2. — С. 66–73.
18. Об одной математической модели шестого порядка с негладкими решениями / А. Д. Баев, Е. А. Бородина, Ф. В. Голованева, С. А. Шабров // Вестн. Воронеж. гос. ун-та. Сер. Физика, математика. — 2018. — № 2. — С. 93–105.
19. Шабров, С. А. Адаптация метода конечных элементов для разнопорядковой математической модели / С. А. Шабров, Н. И. Бугакова, Ф. В. Голованёва // Вестн. Воронеж. гос. ун-та. Сер. Физика, математика. — 2017. — № 4. — С. 145–157.

## REFERENCES

1. Gavrilenko V.I. Optics of Nanomaterials. Singapore, 2011, 326 p.
2. Frecker T., Bailey D., Arzeta-Ferrer X., McBride J., Rosenthala S.J. Review – Quantum dots and their application in lighting, displays, and biology. Journal of Solid State Science and Technology, 2016, vol. 5, no. 1, pp. R3019–R3031.
3. Zhou W., Coleman J.J. Semiconductor quantum dots. Current Opinion in Solid State and Materials Science, 2016, vol. 20, no. 6, pp. 352–360.
4. Wang L., Xu D., Gao J., Chen X., Duo Y., Zhang H. Semiconducting quantum dots: Modification and applications in biomedical science. Science China Materials, 2020, vol. 63, pp. 1631–1650.
5. Mikhlin S.G. Variational methods in mathematical physics. [Mikhlin S.G. Variacionnye metody v matematicheskoy fizike]. Moscow: Nauka, 1970, 512 p.
6. Davydov A.S. Quantum mechanics. [Davydov A.S. Kvantovaya mekhanika]. Saint–Peterburg, 2011, 704 p.
7. Olver F.W.J., Lozier D.W., Boisvert R.F., Clark C.W. NIST Handbook of Mathematical Functions. Cambridge, 2010, 951 p.
8. Nikiphorov A.F., Uvarov V.B. Special functions of mathematical physics. [Nikiphorov A.F., Uvarov V.B. Special'nye funkcii matematicheskoi fiziki]. Moscow: Nauka, 1984, 344 p.
9. Adachi S. GaAs, AlAs, and Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As@B: Material parameters for use in research and device applications. Journal of Applied Physics, 1985, vol. 58, no. 3, pp. R1–R29.
10. Korolev N.V., Smirnov M.S., Ovchinnikov O.V., Shatskikh T.S. Energy structure and absorption spectra of colloidal CdS nanocrystals in gelatin matrix. Physica E, 2015, vol. 68, pp. 159–163.
11. Tomasulo A., Ramakrishna M.V. Quantum confinement effects in semiconductor clusters. II. Journal of Chemistry Physics, 1996, vol. 105, no. 9, pp. 3612–3626.
12. Porrás-Montenegro N., Pérez-Merchancano S.T. Hydrogenic impurities in GaAs-(Ga,Al)As quantum dots. Physical Review B, 1992, vol. 46, no. 5, pp. 9780–9783.
13. Shabrov S.A. Adaptation of the finite element method for mathematical model with nonsmooth solutions. [Shabrov S.A. Adaptaciya metoda konechnyx elementov dlya



matematicheskoyj modeli s negladkimi resheniyami]. *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Fizika. Matematika — Proceedings of Voronezh State University. Series: Physics. Mathematics*, 2016, no. 2, pp. 153–164.

14. Zvereva M.B., Shabrov S.A., Lilov E.V. About the adaptation of the method of finite elements for the solution of a boundary value problem with Stieltjes differentials on a geometric graph. [Zvereva M.B., Shabrov S.A., Lylov E.V. Ob adaptacii metoda konechnyx elementov dlya resheniya granichnoy zadachi s differencialami Stilt'esa na geometricheskom grafe]. *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Fizika. Matematika — Proceedings of Voronezh State University. Series: Physics. Mathematics*, 2014, no. 1, pp. 97–105.

15. Zvereva M.B., Zalukaeva Zh.O., Shabrov S.A. The adaptation of the finite elements method for a problem with discontinuous solutions. [Zvereva M.B., Zalukaeva Zh.O., Shabrov S.A. Ob adaptacii metoda konechnyx elementov dlya zadachi s razryvnymi resheniyami]. *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Fizika. Matematika — Proceedings of Voronezh State University. Series: Physics. Mathematics*, 2016, no. 4, pp. 112–120.

16. Baev A.D., Bakhtina Zh.I., Buneev S.S., Kovalevsky R.A., Babaytsev A.A. On a priori estimates for solutions of boundary value problems for a class of degenerate pseudodifferential equations. [Baev A.D., Baxtina Zh.I., Buneev S.S., Kovalevskiy R.A., Babaytsev A.A. Ob apriornyx ocenках resheniy granichnykh zadach dlya odnogo klassa vyrozhdnykh psevdodifferencial'nykh uravneniy]. *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Fizika. Matematika — Proceedings of Voronezh State University. Series: Physics. Mathematics*, 2018, no. 2, pp. 77–92.

17. Baev A. D., Kobylinskii P. A. Some properties of a class of pseudodifferential operators with degeneration. [Baev A. D., Kobylinskij P. A. O nekotorykh svoystvax odnogo klassa psevdodifferencial'nykh operatorov s vyrozhdeniem]. *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Fizika. Matematika — Proceedings of Voronezh State University. Series: Physics. Mathematics*, 2014, no. 2, pp. 66–73.

18. Baev A.D., Borodina E.A., Golovaneva F.V., Shabrov S.A. About the mathematical model of sixth order with nonsmooth solutions. [Baev A.D., Borodina E.A., Golovaneva F.V., Shabrov S.A. Ob odnoy matematicheskoy modeli shestogo poryadka s negladkimi resheniyami]. *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Fizika. Matematika — Proceedings of Voronezh State University. Series: Physics. Mathematics*, 2018, no. 2, pp. 93–105.

19. Shabrov S.A., Bugakova N.I., Golovaneva F.V. Adaptation of the finite element method for different order mathematical model with nonsmooth solutions. [Shabrov S.A., Bugakova N.I., Golovanyova F.V. Adaptaciya metoda konechnyx elementov dlya raznoporyadkovoy matematicheskoy modeli]. *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Fizika. Matematika — Proceedings of Voronezh State University. Series: Physics. Mathematics*, 2017, no. 4, pp. 145–157.

Королев Никита Викторович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математики ВУНЦ ВВС «ВВА им проф. Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж; инженер кафедры оптики и спектроскопии физического факультета ВГУ, Воронеж, Российская Федерация  
E-mail: korolevn33@yandex.ru

Korolev Nikita Viktorovich, Associate Professor of the Department of Mathematics of MESCAF «N. E. Zhukovsky and Y. A. Gagarin Air Force Academy», Voronezh; Engineer, Department of Optics and Spectroscopy, Physical Faculty, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation  
E-mail: korolevn33@yandex.ru