

## ДОСЛІДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОННОГО СПЕКТРУ СФЕРИЧНОЇ НАНОГЕТЕРОСТРУКТУРИ

У роботі представлені розрахунки хвильової функції та енергії основного стану електрона у сферичній напівпровідниковій гетеросистемі CdS/HgS, що знаходиться у воді як у діелектричному середовищі. Приведена потенціальна енергія заряду у полі індукованої ним поляризації. Отримані залежності потенціальної енергії  $U(r)$  для різних співвідношень між діелектричними проникностями шарів. Рівняння Шредінгера розв'язується за допомогою варіаційного методу Рітца.

Напівпровідникова електроніка базується на можливості керування типом провідності напівпровідника легуванням різними домішками та ідеї інжекції нерівноважних носіїв заряду.

Гетероструктури дають можливість розв'язати більш загально проблему керування фундаментальними параметрами в напівпровідникових кристалах і приладах: шириною забороненої зони, ефективними масами носіїв та їх рухливостями, показником заломлення, електронним енергетичним спектром.

Цікавими об'єктами досліджень стали малорозмірні квантові напівпровідникові системи, зокрема сферичні гетероструктури. Значні досягнення у синтезі таких структур дали можливість порівняння теоретичних та експериментальних результатів [1].

Гетероструктури, як правило, складаються з напівпровідникового ядра та зовнішньої оболонки. Прикладом такої двохшарової системи є ядро CdS покрите декількома сферичними моношарами HgS.

Утворення макроскопічних локальних станів поблизу сферичних поверхонь розділу двох середовищ викликає особливий

інтерес для фізики ультрадисперсійних середовищ. В даний час ця область інтенсивно розвивається.

Розроблені різноманітні методи одержання малих часток різних речовин. Ці методи дозволяють контролювати розміри малих часток в межах від декількох ангстрем до макроскопічних величин. В багатьох випадках форма часток близька до сферичної [2].

В даній роботі розглядається можливість локалізації носіїв заряду в трьохшаровій діелектричній наногетеросистемі.

Розрахунки проводились для трьохшарової діелектричної сферичної гетероструктури CdS/HgS/H<sub>2</sub>O, в шарі HgS якої знаходиться електричний заряд  $e$ , а шар H<sub>2</sub>O простягається до безмежності (Рис.1). Радіуси першого та другого шарів відповідно рівні  $a$  і  $b$ , електричний заряд знаходиться на відстані  $r_0$ , а діелектричні проникливості шарів рівні  $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3$ .

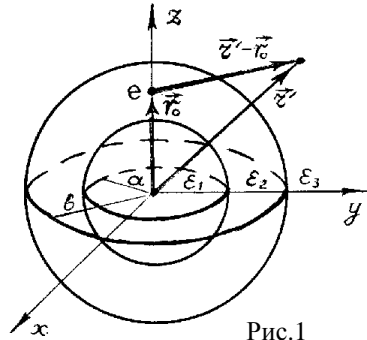


Рис.1

Початок системи координат поміщений в центрі сфери, а вісь Z напрямлена в бік заряду. На заряд, поміщений в середовище, що поляризується, діє локальне поле, що створюється поляризацією, яка індукується цим зарядом. В однорідному середовищі величина цього поля не залежить від положення заряду, а в неоднорідному середовищі вона може суттєво залежати від його положення. Таку залежність можна розглядати як ефективний потенціал  $V(r)$ , який діє на заряд в неоднорідному середовищі.

Потенціал поля поляризаційних зарядів знаходився як розв'язок рівняння Лапласа  $\Delta V=0$  в першій  $0 < r < a$  та третій  $r > b$  областях. В серединній області  $a < r < b$ , де знаходиться точковий заряд  $e$ , потенціал знаходився як розв'язок рівняння Пуассона:

$$\Delta V = -\frac{\rho}{\epsilon_0 \epsilon_2},$$

де густина електричного заряду  $\rho = e\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ .

Потенціал поля точкового заряду  $e$  та поляризаційних зарядів в трьох розглянутих областях дається виразами:

$$V_1(r, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n r^n P_n(\cos \theta) + \frac{e}{4\pi\epsilon_0\epsilon_1 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}, \quad (1)$$

$$V_2(r, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} [B_n r^n + C_n r^{-(n+1)}] P_n(\cos \theta) + \frac{e}{4\pi\epsilon_0\epsilon_2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}, \quad (2)$$

$$V_3(r, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} D_n r^{-(n+1)} P_n(\cos \theta) + \frac{e}{4\pi\epsilon_0\epsilon_3 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}, \quad (3)$$

Вирази  $V_1$ ,  $V_2$ ,  $V_3$  записані для областей  $r < a$ ,  $a < r < b$ ,  $r > b$  відповідно,  $P_n(\cos \theta)$  – поліном Лежандра  $n$ -ї степені.

Постійні інтегрування  $A_n$ ,  $B_n$ ,  $C_n$  та  $D_n$  визначалися з умов неперервності потенціалу та нормальної складової вектора напруженості електростатичного поля на границях поділу середовищ:

$$V_1|_{r=a} = V_2|_{r=a}, \quad \epsilon_1 \frac{\partial V_1}{\partial r} \Big|_{r=a} = \epsilon_2 \frac{\partial V_2}{\partial r} \Big|_{r=a} \quad (4)$$

$$V_3|_{r=b} = V_2|_{r=b}, \quad \epsilon_2 \frac{\partial V_2}{\partial r} \Big|_{r=b} = \epsilon_3 \frac{\partial V_3}{\partial r} \Big|_{r=b} \quad (5)$$

Використовуючи в (1)-(3) розклад по поліномах Лежандра та граничні умови (4), (5), були визначені константи інтегрування.

$$A_n = B_n + C_n a^{-(2n+1)} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{\epsilon_2} - \frac{1}{\epsilon_1} \right) \frac{e}{r_0^{(n+1)}},$$

$$C_n = B_n \frac{b^{2n+1}}{(\epsilon_2 - \epsilon_1)} \left( \epsilon_3 + \frac{n}{n+1} \epsilon_2 \right) - \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_2} r_0^n,$$

$$D_n = C_n + B_n b^{2n+1} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{\epsilon_3} - \frac{1}{\epsilon_2} \right) e r_0^n,$$

$$B_n = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \left[ a^{-(2n+1)} r_0^n \left( \epsilon_1 - \frac{n+1}{n} \epsilon_2 \right) - \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_2} r_0^{-(n+1)} \right] \times$$

$$\times \left\{ (\epsilon_1 - \epsilon_2) + \frac{\left( \epsilon_1 + \frac{n+1}{n} \epsilon_2 \right) \left( \epsilon_3 + \frac{n}{n+1} \epsilon_2 \right)}{(\epsilon_1 - \epsilon_2)} \left( \frac{b}{a} \right)^{2n+1} \right\}^{-1}$$

Потенціальна енергія взаємодії заряду з безінерційною поляризацією поля самодії розраховувалась наступним чином:

$$U(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0, \theta) = \int V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0, \theta') e \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}',$$

$$\text{де } V(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0, \theta) = \begin{cases} V_1(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0, \theta), & r < a \\ V_2(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0, \theta), & a < r < b \\ V_3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0, \theta), & r > b \end{cases}$$

і результати обчислень для різних значень діелектричних проникливостей шарів наногетеросистеми при  $\theta' = 0$  представлені на рис.2,3.

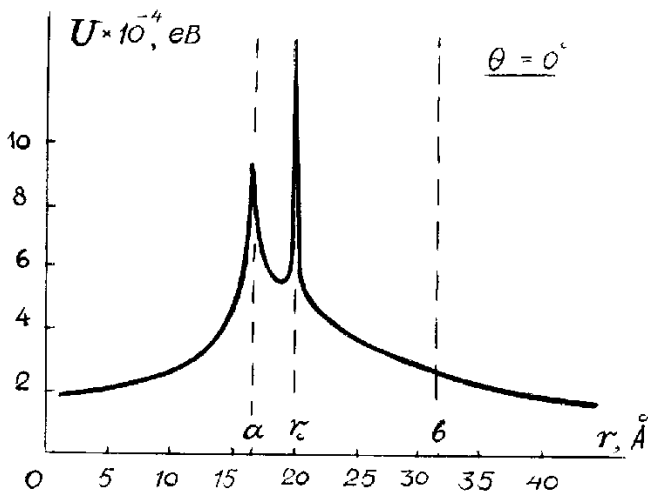


Рис.2. Потенціальна енергія заряду в полі сил самодії при  $\theta' = 0$ ,  $\epsilon_1 = 5,5$ ;  $\epsilon_2 = 11,36$ ;  $\epsilon_3 = 1,78$ .

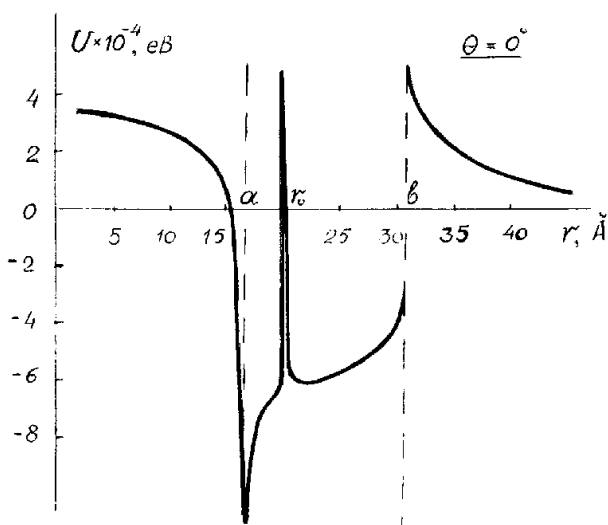


Рис.3. Потенціальна енергія при  $\theta^{\circ}=0$ ,  $\epsilon_1=8,5$ ;  $\epsilon_2=1,36$ ;  $\epsilon_3=15$ .

При інших значеннях кута  $\theta$  характер залежності потенціальної енергії заряду від радіусу-вектора  $r$  зберігаються, тільки щезає пік при  $r=r_0$ .

Розглянемо тепер можливість виникнення зв'язаних станів в досліджуваній системі. Знайдемо енергію та хвильову функцію основного стану заряду в наносфері. Завдяки сферичній симетрії зарядові стани в полі сил самодії характеризуються звичайними для руху в центрально-симетричному полі орбітальним та магнітним квантовими числами  $l$  і  $m$ .

Для знаходження дискретного спектру необхідно розв'язати радіальне рівняння Шредінгера. Для основного стану воно набуває вигляду:

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[ \frac{d^2 R_{10}(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{10}(r)}{dr} \right] + [U(r) - E_{10}] R_{10}(r) = 0, \quad (6)$$

де  $m^*$ -ефективна маса заряду.

Рівняння (6) точно не розв'язується, тому енергія та хвильова функція основного стану знаходились варіаційним

методом Рітца.

Враховуючи кулонівський характер поведінки потенціалу досліджуваної системи, радіальні власні функції дискретного спектру заряду вибирались у вигляді[3]:

$$R_{nl}(r) = C(2\varepsilon)^{3/2} e^{-\frac{1}{2}\rho} \rho^l F[-(n-l-1), 2l+2, \rho],$$

$$\rho = 2\varepsilon r = \frac{2r}{n}, \quad C = \text{const},$$

$F(\alpha, \beta, x)$ -вироджена гіпергеометрична функція.

Для основного стану ( $n=1, l=0$ ) гіпергеометрична функція

рівна 1 і пробна хвильова функція  $R_{10}(r) = A_i e^{-\frac{\alpha_i}{K_i} r}$ ,

де  $\alpha$ -варіаційний параметр,  $K_i = \frac{\hbar^2 \varepsilon_i}{m_i^* r_{Bi}^2}$ ,  $\varepsilon_i (i=1,2,3)$  - діелектричні

проникності середовищ наногетеросистеми,  $r_{Bi}$  - радіус Бора.

$$r_{Bi} = \frac{\varepsilon_i \hbar^2}{m_i^* e^2}.$$

Після нормування хвильової функції на 1, отримаємо, що

$$R_{10}(r) = \sqrt{\frac{2\alpha_i}{K_i}} e^{-\frac{\alpha_i}{K_i} r}.$$

Енергія основного стану заряду визначалась мінімізацією по параметру  $\alpha$  функціоналу

$$I = \int_0^\infty R_{10}(\alpha, r) \left[ \frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + U(r) \right] R_{10}(\alpha, r) dr. \quad (7)$$

При чисельних розрахунках використовувались наступні значення параметрів:

- 1) постійні ґратки:  $a_{CdS} = 5,818 \text{ \AA}$ ,  $a_{HgS} = 5,851 \text{ \AA}$ ;
- 2) ефективна маса заряду:  $m_{HgS} = 0,03 m_e$ ,  $m_{CdS} = 0,2 m_e$ .

Радіус ядра структури  $a=3a_{\text{CdS}}=17,457\text{\AA}$ , радіус оболонки HgS:  $b=a+2a_{\text{HgS}}=29,156\text{\AA}$ .

Енергія основного стану електричного заряду, знайдена шляхом мінімізації функціоналу(7), рівна:

$$E_0=6,1\cdot 10^{-4}\text{eV}.$$

Отримане значення енергії близьке до енергії зв'язку екситона великого радіуса в напівпровідниках, і тому вивчення розглянутих станів знаходиться в межах тих же експериментальних можливостей, які необхідні для дослідження екситонів Ваньє-Мотта в масивних кристалах при низьких температурах.

#### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Quantum dot quantum well CdS/HgS/CdS:theory and experiment / Schooss D., Mews F., Eychmiller A., Weller H. // Phys.Rev.-1994.- **49**, N24, P.17072-17078.
2. Екимов А.И., Онущенко А.А. Квантово-размерные эффекты в трехмерных полупроводниковых микрокристаллах // Письма в ЖЭТФ.- 1981.-**34**, №6.-С.363-386.
3. Бетте Г. Квантовая механика простейших систем.-Москва: ОНТИ, 1935.-399с.

#### SUMMARY

IVANOCHKO M.M., KUCHERA Y.V., TKACH M.V.

#### INVESTIGATION OF ELECTRON SPECTRUM OF SPHERIC NANOGETEROSTRUCTURE

Numeric calculations are made for wave function and energy of basic state of electron in spheric semiconductor CdS/HgS heterosystem located in water as in dielectric medium. Potential energy of the charge in the field of induced polarisation is shown in the paper. Conditions of potential energy  $U(r)$  for different correlations between dielectric permittivities of layers are obtained. Schrödinger equation is solved by means of Ritz variation method.