

ЕЛЕКТРОННИЙ І ДІРКОВИЙ СПЕКТРИ ПЕРІОДИЧНИХ СФЕРИЧНИХ НАНОГЕТЕРОСТРУКТУР ІЗ ВНУТРІШНІМ БАР'ЄРОМ

В. А. Головацький

Чернівецький державний університет,
вул. Коцюбинського, 2, Чернівці, 274012, Україна

(Отримано 10 квітня 1998 р.; в остаточному вигляді — 29 жовтня 1998 р.)

У наближенні методу ефективних мас розв'язано рівняння Шредингера для електрона та дірки у сферичній наногетероструктурі, побудованій з періодично розміщених напівпровідникових шарів HgS та CdS. Отримано залежність енергетичного спектра електрона та дірки від радіуса внутрішнього кристала CdS. Розраховані ймовірності радіального розподілу квазічастинок у гетероструктурі при різних значеннях радіуса внутрішнього кристала. Досліджено локалізацію електронів та дірок у різних шарах HgS та ефект просторового розділення зарядів.

Ключові слова: сферична наногетеросистема, квантова яма, електрон, дірка.

PACS number(s): 79.60.Jv

Створення напівпровідникових гетероструктур нанорозмірів (0–50 нм) стало реальністю, яка відкрила новий розділ фізики, що якісно відрізняється від фізики мікророзмірів та мезоскопічної фізики. Сучасні технології дозволяють створювати наногетероструктури різної симетрії. Серед них плоскі двовимірні плівки, які можуть утворювати надгратку, одновимірні циліндричні квантові дроти та нульвимірні квантові точки, так звані “штучні атоми”. Кожний з цих об'єктів має свої специфічні властивості. Основною особливістю квантових точок є те, що квазічастки в таких системах мають чітко дискретний спектр. Таким чином, прилади, створені на основі таких квантових точок, будуть мати унікальні параметри. Наприклад, напівпровідникові лазери матимуть надвисоку температурну стабільність, яка забезпечується переходами між дискретними енергетичними рівнями. У роботі [1] детально описані переваги гетероструктур із квантовими точками над напівпровідниковими структурами вищих розмірностей.

Квантові точки можуть бути не однорідними, а складними конструкціями. У роботі [2] досліджено сферичні наногетероструктури CdS/HgS/CdS/H₂O, тобто сферичний нанокристал CdS, покритий шарами HgS та CdS і поміщений у воду. Потенціал для електронів у таких структурах має вигляд сферичної потенціальної ями скінченної глибини. У цій роботі в однозонному наближенні розраховані енергії екситонних збуджень при різних значеннях розмірів такої структури, які добре узгоджуються з експериментальними даними. У роботі [3] розрахована енергія основного екситонного стану у сферичній наногетеросистемі CdS/HgS/H₂O з урахуванням екситон-фононної взаємодії.

У нашій роботі досліджуємо електронний та дірковий спектри в складній сферичній наногетероструктурі, побудованій з періодично розміщених шарів HgS та CdS. При цьому для електронів та дірок утворюється потенціал, який складається зі сферичних ям та бар'єрів. Енергетичний спектр квазічастинок визначається розмірним квантуванням, а вигляд хвильових функцій указує на локалізацію електронів та дірок, яка має цікаві особливості. Вивчення цих особливостей є метою нашої роботи.

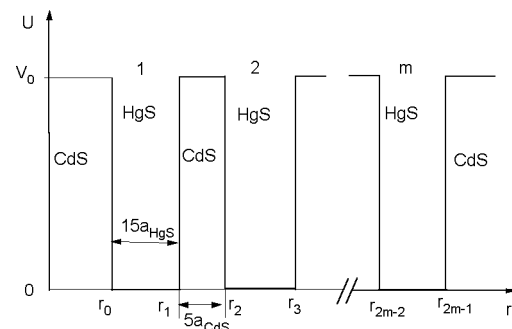


Рис. 1. Потенціал системи.

За початок відліку енергії електрона виберемо дно зони провідності кристала HgS, а дірки — стелю валентної зони цього ж кристала, тоді потенціал, що складається з m коаксіальних сферичних квантових ям (рис. 1), має вигляд

$$U^{e,h}(r) = \begin{cases} V_0^{e,h}; & 0 < r < r_0, r_{2n-1} < r < r_{2n}, r > r_{2m-1} \\ 0; & r_{2n-2} < r < r_{2n-1}, r_{2m-2} < r < r_{2m-1}, \quad n = 1, 2, \dots, m-1, \end{cases} \quad (1)$$

а ефективна маса

$$m_{e,h}(r) = \begin{cases} m_0^{e,h}; & 0 < r < r_0, r_{2n-1} < r < r_{2n}, r > r_{2m-1} \\ m_1^{e,h}; & r_{2n-2} < r < r_{2n-1}, r_{2m-2} < r < r_{2m-1}, \end{cases} \quad n = 1, 2, \dots, m - 1. \quad (2)$$

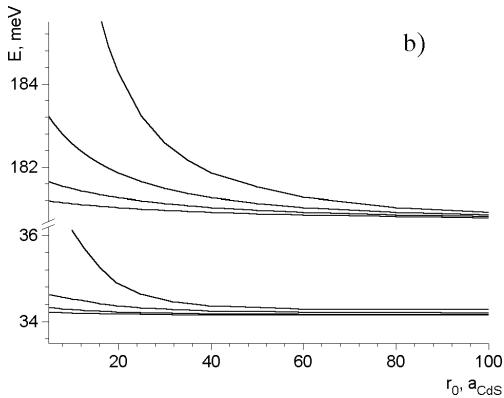
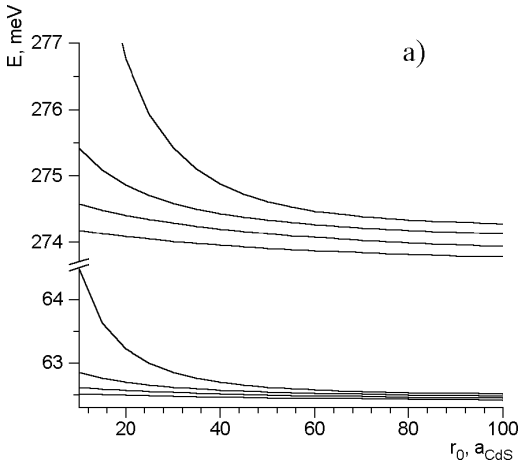


Рис. 2. Залежність електронного (а) і діркового (б) спектрів (при $l = 0$) від ширини внутрішнього шару CdS.

Рівняння Шредингера для електрона чи дірки в складній сферичній гетеросистемі в загальному вигляді для довільних товщин кожного шару гетеросистеми розв'язане в роботі [4]. Енергетичний спектр квазічасток визначено з дисперсійного рівняння, яке отримують з умов неперервності хвильової функції та потоків імовірності на границях розділу середовищ. Дисперсійне рівняння містить визначник розмірності $4m \times 4m$, елементами якого є сферичні функції Бесселя та Наймана і який має просту й однотипну структуру. У роботі [4] отримані рекурентні співвідношення, які дозволяють записати в аналітичному вигляді дисперсійне рівняння та невідомі ко-

ефіцієнти для хвильових функцій. Урахування періодичності цієї системи мало спрощує дисперсійне рівняння, тому всі подальші розрахунки проводили чисельними методами.

Розрахунки спектрів квазічасток проводили для сферичної наногетеросистеми з $m = 4$ та параметрами матеріалів, які наведені в таблиці.

середовище	$m_e(m_0)$	$m_h(m_0)$	$V_0^e(eV)$	$V_0^h(eV)$	$a(\text{Å})$
CdS	0.2	0.7	1.2	0.8	5.818
HgS	0.036	0.044	0	0	5.851

Таблиця. Параметри кристалів.

Результати розрахунків подано на рисунках 2–3. На рис. 2 зображено залежності спектрів електрона та дірки від r_0 при $l = 0$. Як видно з рисунка, спектри являють собою серії з 4-х рівнів, які, спадаючи зі збільшенням r_0 , виходять на насичення і при достатньо великих значеннях r_0 збігаються з відповідними значеннями енергій для подібної плоскої гетероструктури. Зрозуміло, що кожна серія рівнів складається з рівнів розмірного квантування всіх чотирьох сферичних квантових ям. При цьому найнижчий рівень відповідає ямі, що має найменшу енергію розмірного квантування. Оскільки всі квантові ями однакової ширини, то найменшу енергію квазічастка матиме у сферичній ямі з найбільшим радіусом кривини, тобто в ямі, що має найбільший об'єм.

Розрахунок хвильових функцій дав змогу побудувати розподіл радіальної ймовірності знаходження електрона та дірки, тобто визначити локалізацію квазічастки. На рис. 3 зображено ймовірності радіального розподілу електронів та дірок у найнижчих енергетичних станах при різних значеннях r_0 . З рис. 3а видно, що при $r_0 = 20a_{\text{CdS}}$ (a_{CdS} — постійна ґратки кристала CdS) електрон, перебуваючи в стані з найменшою енергією, майже повністю локалізується в зовнішній потенціальної ямі і лише з невеликою ймовірністю може тунелювати в сусідню внутрішню яму. Дірка, маючи більшу ефективну масу, у тих самих умовах, локалізувавшись у зовнішній ямі, не може тунелювати в сусідню яму. Із збільшенням r_0 різниця в об'ємі квантових ям зменшується, відповідні енергетичні рівні зближуються, і ймовірність тунелювання квазічасток у сусідні ями збільшується. З рис. 3б, 3с видно, що при $r_0 =$

$100a_{\text{CdS}}$ та $r_0 = 200a_{\text{CdS}}$ електрон, займаючи найнижчий енергетичний стан, з більшою ймовірністю перебуває в середніх ямах і з меншою ймовірністю з'являється в зовнішній та внутрішній ямах, ще зберігаючи тенденцію притягання до зовнішніх ям. Важка дірка все ще залишається в зовнішній ямі. На рис. 3д при $r_0 = 600a_{\text{CdS}}$ уже обидві квазічастки знаходяться в середніх квантових ямах, це означає, що досліджувана сферична гетеросистема вже має всі ознаки плоскої двовимірної системи.

Важливо відзначити, що енергетичні спектри як

електрона, так і дірки вже при $r_0 = 100a_{\text{CdS}}$ збігаються з відповідними спектрами для плоскої гетеросистеми, хоча хвильові функції квазічасток, особливо для дірки, зберігають властивості сферичної системи до значно більших значень r_0 . Різна поведінка електронів і дірок у подібній гетероструктурі приводить до ефекту просторового розділення зарядів, що викличе появу внутрішнього локального електричного поля та зменшення енергії електрон-діркової взаємодії, тобто зменшення енергії екситонів.

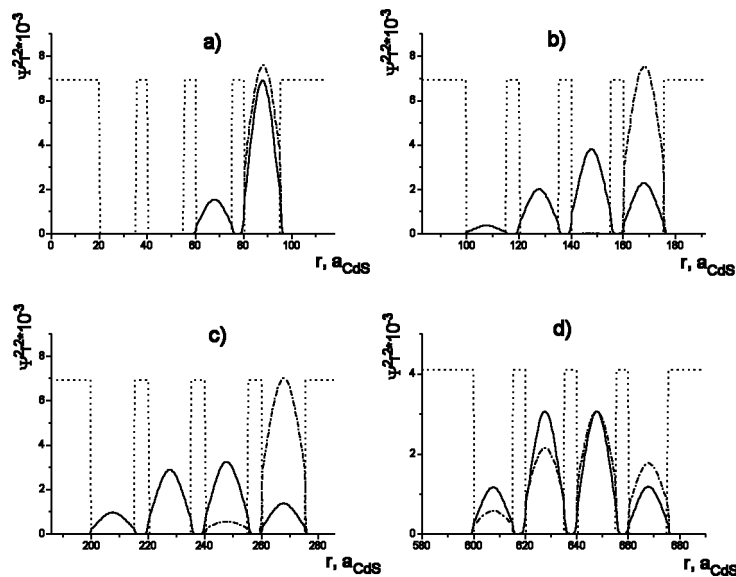


Рис. 3. Ймовірності радіального розподілу електронів (суцільні криві) та дірок (штрихові криві) при: а) $r_0 = 20a_{\text{CdS}}$, б) — $100a_{\text{CdS}}$, в) — $200a_{\text{CdS}}$, д) — $600a_{\text{CdS}}$.

[1] Ж. И. Алферов, *Физ. техн. полупр.* **32**, 3 (1998).

[2] D. Schooss, A. Mews, A. Eychemuller, H. Weller, *Phys. Rev. B* **24**, 17072 (1994).

[3] M. Tkach, V. Holovatsky, O. Voitsekhivska, M. Min'kova, *Phys. Status Solidi B* **203**, 373 (1997).

[4] Н. В. Ткач, *Физ. тверд. тела* **39**, 1109 (1997).

ELECTRON AND HOLE SPECTRUM IN PERIODICAL SPHERICAL NANOHETEROSYSTEM WITH INTERNAL BARRIER

V. Holovatsky

*Chernivtsi State University, Department of Theoretical Physics
2 Kotsiubyns'kyi Str., Chernivtsi, UA-274012, Ukraine*

The Schrödinger equation for electron and hole in spherical nanoheterostructure created of periodically located semiconductor layers HgS and CdS is solved within the effective mass approximation. The dependence of electron and hole spectra on the radius of the CdS internal crystal is obtained. The probabilities of the internal crystal radius are calculated. The localization of electrons and holes in different HgS layers and the effect of space separation of charges are investigated.