ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 2, № 4 (1998) с. 583–585

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 2, No. 4 (1998) p. 583–585

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 Шредінґера для електрона та дірки у сферичній наногетероструктурі, побудованій з періодично розміщених напівпровідникових шарів HgS та CdS. Отримано залежність енерґетичного спектра електрона та дірки від радіуса внутрішнього кристала CdS. Розраховані ймовірності радіяльного розподілу квазічасток у гетороструктурі 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 надґратку, 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 $CdS/HgS/CdS/H_2O$, тобто сферичний нанокристал CdS, покритий шарами HgS та CdS і поміщений у воду. Потенціял для електронів у таких структурах має вигляд сферичної потенціяльної ями скінченної глибини. У цій роботі в однозонному наближенні розраховані енерґії 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 $CdS/HgS/H_2O$ 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 потенціял, який складається зі сферичних ям та бар'єрів. Енерґетичний спектр квазічасток визначається розмірним квантуванням, а вигляд хвильових функцій указує на локалізацію електронів та дірок, яка має цікаві особливості. Вивчення цих особливостей є метою нашої роботи.

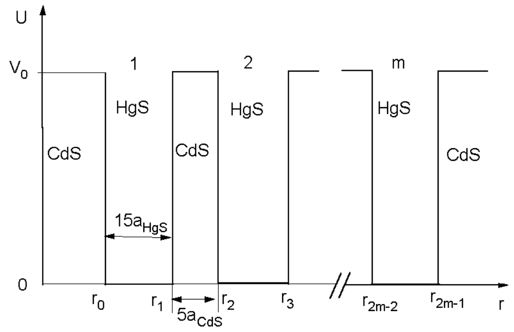


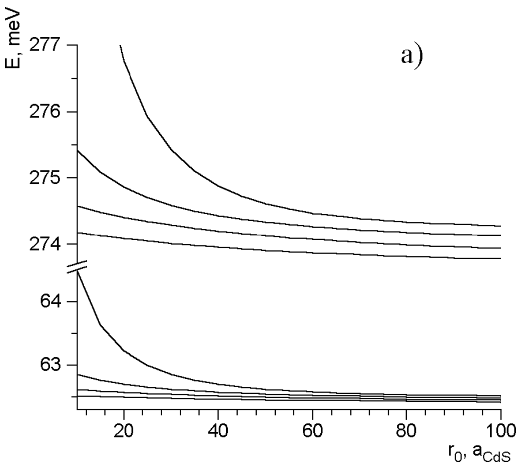
Рис. 1. Потенціял системи.

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

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

а ефективна маса

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



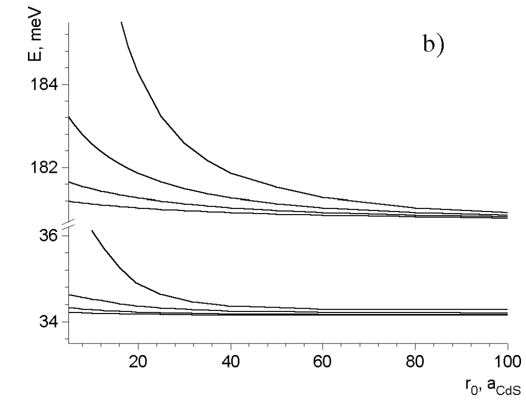


Рис. 2. Залежність електронного (a) і діркового (b) спектрів (при $l=0$) від ширини внутрішнього шару CdS.

Рівняння Шрединґера для електрона чи дірки в складній сферичній гетеросистемі в загальному вигляді для довільних товщин кожного шару гетеросистеми розв'язане в роботі [4]. Енерґетичний спектр квазічасток визначено з дисперсійного рівняння, яке отримують з умов неперервности хвильової функції та потоків імовірности на границях розділу середовищ. Дисперсійне рівняння містить визначник розмірністю $4m\times 4m$, 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 коефіцієнти для хвильових функцій. Урахування періодичности 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 матеріялів, які наведені в таблиці.

середовище	$m_e(m_0)$	$m_h(m_0)$	$V_0^e(eV)$	$V_0^h(eV)$	$a(\AA)$
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 енерґій 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 енерґію розмірного квантування. Оскільки всі квантові ями однакової ширини, то найменшу енерґію квазічастка матиме у сферичній ямі з найбільшим радіусом кривини, тобто в ямі, що має найбільший об'єм.

Розрахунок хвильових функцій дав змогу побудувати розподіл радіяльної ймовірности знаходження електрона та дірки, тобто визначити локалізацію квазічастки. На рис. 3 зображено ймовірності радіяльного розподілу електронів та дірок у найнижчих енерґетичних станах при різних значеннях r_0. З рис. 3а видно, що при $r_0=20a_{\mathrm{CdS}}$ (a_{CdS} — постійна ґратки кристала CdS) електрон, перебуваючи в стані з найменшою енерґією, майже повністю локалізується в зовнішній потенціяльній 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 енерґетичні рівні зближаються, і ймовірність тунелювання квазічасток у сусідні ями збільшується. З рис. 3b, 3c видно, що при r_0 =

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

Важливо відзначити, що енерґетичні спектри як електрона, так і дірки вже при $r_0 = 100a_{\mathrm{CdS}}$ 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 енерґії електрон–діркової взаємодії, тобто зменшення енерґії екситонів.

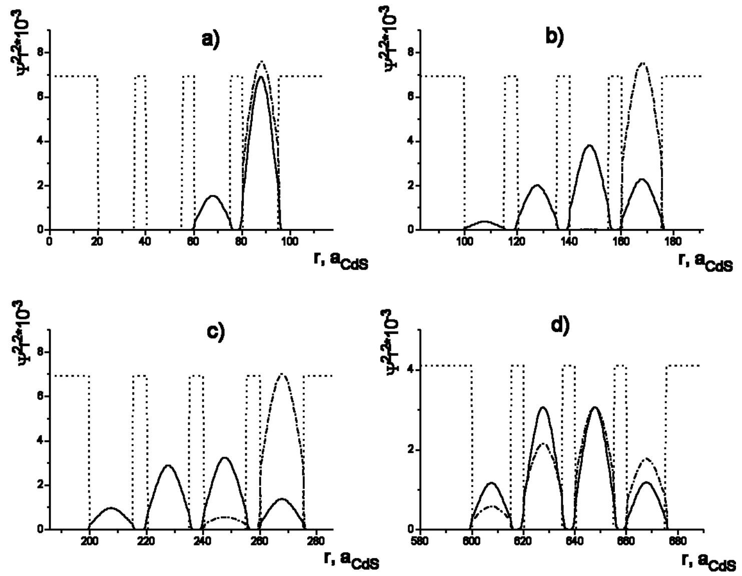


Рис. 3. Ймовірності радіяльного розподілу електронів (суцільні криві) та дірок (штрихові криві) при: a) $r_0 = 20a_{\mathrm{CdS}}$, b) — $100a_{\mathrm{CdS}}$, c) — $200a_{\mathrm{CdS}}$, d) — $600a_{\mathrm{CdS}}$.

[1] Ж. И. Алферов, Физ. техн. полупр. **32**, 3 (1998).
[2] D. Schooss, A. Mews, A. Eychmuller, 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.