

## ВПЛИВ СИЛ ЗОБРАЖЕНЬ НА ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ЕЛЕКТРОНА В СКЛАДНОМУ СФЕРИЧНОМУ МІКРОКРИСТАЛІ CdS/ $\beta$ -HgS/H<sub>2</sub>O

В. І. Бойчук, Р. Ю. Кубай, І. В. Білинський

*Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,  
кафедра теоретичної фізики,  
вул. Івана Франка, 24, Дрогобич, 293720, Україна  
(Отримано 29 січня 1999 р.)*

На основі розв'язку рівняння Пуассона в роботі визначено явний вигляд потенціальної енергії зарядженої частинки для складної сферичної наносистеми як функції відстані до спільного центра сферичних поверхонь ( $r$ ). Проведено загальний аналіз потенціалів у трьох випадках, коли  $r < a$ ,  $a < r < b$ ,  $b < r$  ( $a$ ,  $b$  — радіуси меж поділу). Знайдено енергію зарядженої частинки, що міститься у внутрішньому шарі системи, і проаналізовано залежність від радіуса шару та вибору різних пробних хвильових функцій.

**Ключові слова:** сферична квантова крапка, потенціальна енергія, пробна хвильова функція.

PACS numbers: 73.20.-г.

### ВСТУП

Дослідження фізичних властивостей низьковимірних гетероструктур, яке триває з початку 80-х років [1–3], і в наш час залишається надзвичайно актуальним. Це пояснюється технологічними можливостями створення складних гетеросистем на основі різних типів напівпровідникових сполук, що мають великі наукові та прикладні перспективи [4–7].

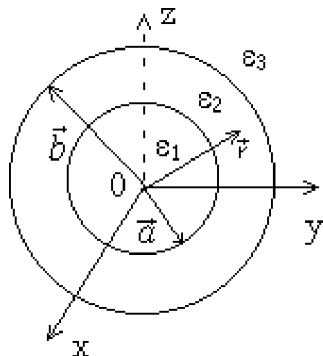


Рис. 1. Модель сферичної гетеросистеми.

У більшості теоретичних робіт із цієї тематики використовують прості моделі нескінчених або скінчених потенціальних ям. Тому розрахунок фізичних параметрів систем проводять з урахуванням лише розмірного квантування для квазічастинок системи.

У роботі [2] вперше знайдено вигляд потенціалу сил електростатичних зображень для зарядженої квазічастинки (електрона, дірки), яка знаходиться всередині чи зовні сферичного мікрокристала, що поміщений у матрицю. Показано, що врахування електростатичної взаємодії заряду з поверхнею може поліпшити збіжність даних теорій та експерименту

[5,7]. Згідно з висновками цих робіт, сили зображень є суттєвими у випадку виконання таких нерівностей:  $a_0 \leq a_h < a \leq a_e \approx a_{ex}$ , де  $a_0$  — розмір порядку міжатомної взаємодії,  $a_h = \frac{\epsilon \hbar^2}{m_h e^2}$ ,  $a_e = \frac{\epsilon \hbar^2}{m_e e^2}$ ,  $a_{ex} = \frac{\epsilon \hbar^2}{\mu e^2}$ , — борівські радіуси дірки, електрона, екситона відповідно,  $a$  — радіус нанокристала.

Метою нашої роботи є розрахунок потенціалу сил зображень для складної сферичної наноструктури, у якій кулястий кристал охоплений шаром іншого напівпровідника. На основі отриманого потенціалу знайдено енергію зарядженої частинки, що знаходиться у внутрішньому шарі системи CdS/ $\beta$ -HgS/H<sub>2</sub>O.

### 1. ПОТЕНЦІАЛ ЗАРЯДУ ВСЕРЕДИНІ І ЗОВНІ СКЛАДНОГО НАНОКРИСТАЛА

Розглядаємо складну сферичну гетеросистему, яка зображена на рис. 1. (радіус нанокристала з діелектричною проникністю  $\epsilon_1$  дорівнює  $a$ , а зовнішній радіус напівпровідникового шару з діелектричною проникністю  $\epsilon_2$  дорівнює  $b$ ). Уся ця двошарова наносистема поміщена в матрицю з діелектричною проникністю  $\epsilon_3$ .

Унаслідок сферичної симетрії системи, задачу про знаходження потенціалу зарядженої частинки зручно розв'язувати у сферичній системі координат. Рівняння Пуассона

$$\nabla^2 \varphi = 4\pi e \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \quad (1)$$

для частинки, яка знаходиться в областях  $r_0 < a$ ,  $a < r_0 < b$ ,  $b < r_0$ , розв'язано з урахуванням неперервності потенціалу і нормальної складової вектора індукції для електростатичного поля. Функцію  $\varphi = \varphi(\mathbf{r})$  зручно подати у вигляді:

$$\varphi = \begin{cases} \varphi_1, & r < a, \\ \varphi_2, & a < r < b, \\ \varphi_3, & b < r, \end{cases} \quad (2)$$

$\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$  — є розв'язки рівнянь Пуассона чи Лапласа. Зокрема для випадку, коли частинка знаходиться у внутрішньому шарі ( $r_0 < a$ ), одержано:

$$\varphi_1 = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \left(\frac{r}{a}\right)^n P_n(\cos\Theta) + \frac{e}{R\varepsilon_1},$$

$$\varphi_2 = \sum_{n=0}^{\infty} \left[ B_n \left(\frac{r}{a}\right)^n + C_n \left(\frac{b}{r}\right)^{n+1} \right] P_n(\cos\Theta), \quad (3)$$

$$\varphi_3 = \sum_{n=0}^{\infty} D_n \left(\frac{b}{r}\right)^{n+1} P_n(\cos\Theta),$$

$$R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| = \sqrt{r^2 + r_0^2 - 2rr_0\cos\Theta},$$

$P_n(x)$  — поліном Лежандра [8].

Урахування крайових умов на межах середовищ дозволяє визначити сталі коефіцієнти  $A_n, B_n, C_n, D_n$  і, таким чином, установити залежність  $\varphi = \varphi(\mathbf{r})$  для розглядуваного неоднорідного середовища, коли  $r_0 < a$ . Проводячи аналогічні обчислення, визначаємо явний вигляд функцій  $\phi(\mathbf{r})$  для інших двох випадків розміщення заряду ( $a < r_0 < b, b < r_0$ ). Маючи вигляд функції  $\varphi = \varphi(\mathbf{r})$ , обчислюємо поверхневу густину зв'язаних зарядів  $\delta_{3b}$  на межах середовищ. Енергію взаємодії заряду в точці  $\mathbf{r}$  із зв'язаними зарядами на межах поділу визначаємо формулою:

$$U = \frac{1}{2} \int_{S_1} \frac{\delta_{3b}^{(1)} \epsilon dS_1}{|\mathbf{a} - \mathbf{r}|} + \frac{1}{2} \int_{S_2} \frac{\delta_{3b}^{(2)} \epsilon dS_2}{|\mathbf{b} - \mathbf{r}|} \quad (4)$$

Після відповідних перетворень одержано, що потенціальна енергія заряду може бути записана у вигляді:

$$U \equiv U_i = \frac{e^2}{2\varepsilon_1 a (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)} \left\{ \frac{a^2}{a^2 - r^2} + \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} F \left( 1, \alpha_1, \alpha_1 + 1, \left(\frac{r}{a}\right)^2 \right) \right\} + \frac{e^2}{2a (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{r}{a}\right)^{2n} \frac{(2n+1)^2}{n\varepsilon_{12}} \frac{1}{Z_n}, \quad \text{для } r < a; \quad (5)$$

$$U \equiv U_m = \frac{e^2}{2\varepsilon_2 a (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)} \left\{ \frac{a^2}{a^2 - r^2} + \left(\frac{a}{r}\right)^2 F \left( 1, \alpha_1, \alpha_1 + 1, \left(\frac{a}{r}\right)^2 \right) \right\} + \frac{e^2}{2\varepsilon_2 b (\varepsilon_2 + \varepsilon_3)} \left\{ \frac{b^2}{b^2 - r^2} + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_3} F \left( 1, \alpha_2, \alpha_2 + 1, \left(\frac{r}{b}\right)^2 \right) \right\} + \frac{e^2}{2\varepsilon_2 r} \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \left(\frac{a}{r}\right)^{2n+1} \frac{n(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{\varepsilon_{12}} - \left(\frac{r}{b}\right)^{2n+1} \frac{(n+1)(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)}{\varepsilon_{23}} - 2 \right\} \frac{1}{Z_n}, \quad \text{для } a < r < b; \quad (6)$$

$$U \equiv U_e = \frac{e^2}{2\varepsilon_3 b (\varepsilon_2 + \varepsilon_3)} \left\{ \frac{b^2}{b^2 - r^2} + \left(\frac{b}{r}\right)^2 F \left( 1, \alpha_2, \alpha_2 + 1, \left(\frac{b}{r}\right)^2 \right) \right\} - \frac{e^2}{2b (\varepsilon_2 - \varepsilon_3)} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{b}{r}\right)^{2n+2} \frac{(2n+1)^2}{(n+1)\varepsilon_{23}} \frac{1}{Z_n}, \quad \text{для } b < r, \quad (7)$$

де  $F(x, y, z, u)$  — гіпергеометрична функція [8],

$$Z_n = 1 + \left(\frac{b}{a}\right)^{2n+1} \frac{1}{n(n+1)} \frac{\varepsilon_{12}\varepsilon_{23}}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)},$$

$$\varepsilon_{12} = \varepsilon_1 n + \varepsilon_2 (n+1), \quad \varepsilon_{23} = \varepsilon_2 n + \varepsilon_3 (n+1),$$

$$\alpha_1 = \frac{\varepsilon_2}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)}, \quad \alpha_2 = \frac{\varepsilon_3}{(\varepsilon_2 + \varepsilon_3)}.$$

Формули для  $U = U(r)$  в усіх трьох випадках записано аналогічно до відповідних формул простого сферичного нанокристала [2]. Із формул (5)–(7) видно, що потенціальна енергія складної наносистеми містить один доданок кулонівського типу, якщо  $r < a$  або  $b < r$ , але, якщо  $a < r < b$ , то у функції  $U = U(r)$  є два кулонівські доданки. Як показує аналіз, ці доданки дають основний внесок в енергію системи. Крім них, потенціальна енергія заряду містить, як і в [2], одну чи дві гіпергеометричні функції. Наявність двох меж поділу відбилась у потенціалах на тому, що, крім згаданих доданків, виникають ще швидкозбіжні ряди (“залишкові” доданки), які не вдається виразити через відомі функції.

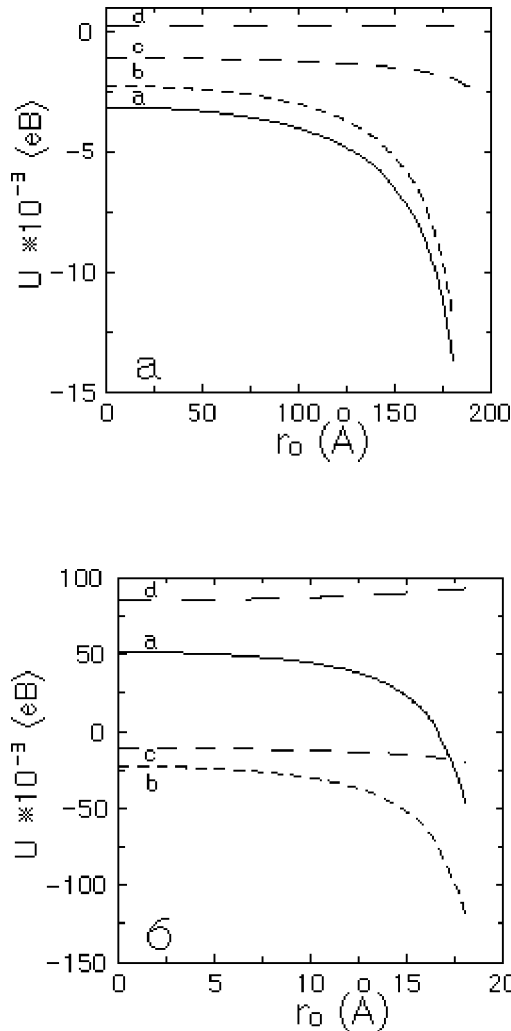


Рис. 2. Залежність потенціальної енергії від відстані заряду до центра системи ( $0 < r_0 < a$ ) для структури CdS/ $\beta$ -HgS/H<sub>2</sub>O: а)  $a = 0.2 \times 10^3$  Å,  $b = 1.5 \times 10^4$  Å; б)  $a = 20$  Å,  $b = 40$  Å; крива а — повна енергія системи; крива б — вклад кулонівського доданка; крива с — вклад гіпергеометричної функції; крива d — вклад “залишковий” доданка.

## II. ЕНЕРГІЯ ЧАСТИНКИ У ВНУТРІШНЬОМУ ШАРІ

Рівняння Шредингера для випадку  $r < a$  основного стану має вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + U_i(r) \right) \psi_0(r) = E \psi_0(r). \quad (8)$$

Якщо виразити функцію  $\psi_0(r)$  через невідому  $R_0(r)$  за формулою:

$$\psi_0(r) = \frac{1}{r} R_0(r),$$

то рівняння (8) спрощується:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2}{dr^2} R_0(r) + U_i(r) \right) \psi_0(r) = E R_0(r).$$

Аналіз залежності  $U_i = U_i(r)$  дає змогу встановити внесок кожного доданка функції. На рис. 2а подано результати обчислень функції  $U_i(r)$  для структури CdS/ $\beta$ -HgS/H<sub>2</sub>O, коли величина першого шару  $a = 0.2 \times 10^3$  Å, другого —  $b = 1.5 \times 10^4$  Å. Унаслідок значної величини радіуса зовнішньої сфери результати обчислень можна порівняти з даними для потенціалу простого кулястого мікрочастинки [2]. Видно, що внесок кулонівського потенціалу є основним, а “залишковий” доданок дає незначний вклад і в граничному випадку, коли  $b \rightarrow \infty$ , перетворюється в нуль. Урахування гіпергеометричної функції веде до збільшення значень потенціалу при малих  $r$  і деякої зміни залежності від радіуса, коли  $r$  близьке до  $a$ .

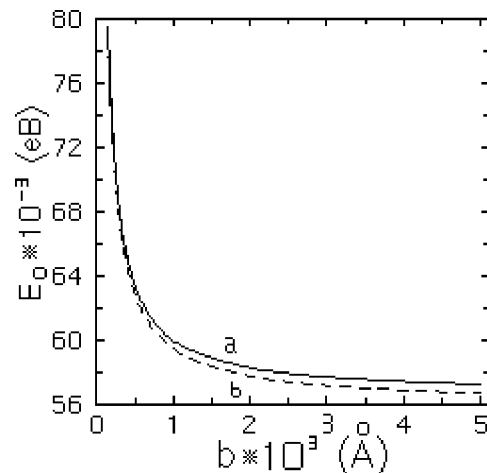


Рис. 3. Залежність повної енергії заряду від радіуса проміжного шару  $b$  ( $a = 50$  Å): крива а відповідає за вибір хвильової функції у вигляді  $R_0''$ , крива б — у вигляді  $R_0'$ .

Якщо розглянути радіуси  $a$  і  $b$  близькими до тих, що досліджуються експериментально (рис. 2б), то видно, що внесок “залишкового” доданка може бути досить значним.

Розглянемо рівняння (9). У зв'язку з тим, що розв'язати його точно неможливо, використовуємо варіаційний метод. Пробну хвильову функцію вибрали у двох виглядах:

$$R'_0 = C \sin\left(\pi \frac{r}{a}\right) \exp\left(\alpha \frac{r}{a}\right),$$

$$R''_0 = C \frac{r}{a} \left(\frac{r}{a} - 1\right) \exp\left(\alpha \frac{r}{a}\right),$$

де  $\alpha$  — варіаційний параметр. При виборі пробних функцій враховували, що хвильова функція в точках  $r = 0$ ,  $r = a$  повинна дорівнювати нулеві. Згідно з варіаційним методом енергію основного стану визначаємо як мінімум функціонала:

$$E_0 = \min I_0(\alpha) = \min \langle R_0(\alpha) | H | R_0(\alpha) \rangle,$$

$$I_0(\alpha) = \int_0^a R_0 \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + U_i(r) \right) R_0 dr.$$

Розрахунки і мінімізацію  $I_0(\alpha)$  виконували на ЕОМ.

Обчислення енергій заряду для різних значень радіуса внутрішньої сфери  $a$  (нанокристала  $CdS$ ) при великому значенні радіуса  $b$  ( $b = 2 \times 10^4$  Å) показало (табл. 1), що в області малих значень радіуса ( $a < 200$  Å) хвильова функція  $R'_0$  ліпше описує основний стан частинки, ніж функція  $R''_0$ . Якщо ж  $a \geq 200$  Å, то отримано зворотний результат.

Проведено також обчислення енергій заряду для різних значень проміжного шару  $b$  (нанокристала  $\beta$ -HgS) при фіксованому значенні радіуса внутрішнього шару  $a$  ( $a = 50$  Å). Видно (рис. 3), що вибір пробної хвильової функції у вигляді  $R'_0$  веде до менших значень  $\min I_0(\alpha)$  і тому краще описує стан частинки.

Таким чином, у результаті дослідження встановлено явний вигляд потенціальної енергії зарядженої частинки для складної сферичної наносистеми від відстані до спільного центра сферичних поверхонь. Проведено загальний аналіз потенціалів у трьох випадках, коли  $r < a$ ,  $a < r < b$ ,  $b < r$ . Знайдено також енергію зарядженої частинки, що знаходиться у внутрішньому шарі кристала і проведено аналіз залежності її від розмірів шарів та вибору різних хвильових функцій.

$a, \text{Å}$	$R'_0 = C \sin \pi \frac{r}{a} \exp\left(\alpha \frac{r}{a}\right)$	$R''_0 = C \frac{r}{a} \left(\frac{r}{a} - 1\right) \exp\left(\alpha \frac{r}{a}\right)$
50	56.02	56.71
100	9.20	9.29
150	1.95	1.96
200	-0.11	-0.12
250	-0.85	-0.87
300	-1.13	-1.16
350	-1.24	-1.26
400	-1.26	-1.28
450	-1.25	-1.27
500	-1.23	-1.24

Таблиця 1. Залежність повної енергії заряду від радіуса внутрішнього шару  $a$  ( $b = 2 \times 10^4$  Å) при виборі різних пробних функцій.

---

[1] А. И. Екимов, Л. А. Онущенко, В. А. Цехомений, Физ. хим. стекла **6**, 511 (1980).  
 [2] Н. П. Ефремов, С. И. Покутний, Физ. тверд. тела **32**, 1637 (1990).  
 [3] В. І. Бойчук, І. В. Білинський, Укр. фіз. журн. **35**, 1495 (1990).  
 [4] D. Schooss, A. Mews, A. Eychmuler, H. Weller, Phys. Rev. B **49**, 17072 (1994).  
 [5] С. І. Покутній, Г. В. Семенова, І. П. Гук, Укр. фіз. журн. **42**, 1230 (1997).  
 [6] Н. В. Ткач, В. И. Бойчук, В. А. Головацкий, О. Н. Войцехивская, Физ. тверд. тела **38**, 3161 (1996).  
 [7] С. І. Покутній, Укр. фіз. журн. **42**, 111 (1997).  
 [8] Г. Корн, Т. Корн, *Справочник по математике (для научных работников и инженеров)* (Москва, Наука, 1974).

**INFLUENCE OF THE IMAGE POTENTIAL ON THE ENERGY SPECTRUM OF  
ELECTRON IN COMPLEX SPHERICAL MICROCRYSTAL CdS/ $\beta$ -HgS/H<sub>2</sub>O**

V. I. Boichuk, R. Yu. Kubay, I. V. Bilynskii  
*Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University, Chair of Theoretical Physics,  
24 Franko Str., Drohobych, UA-293720, Lviv Region, Ukraine  
Tel.: (03244) 2-20-74, fax: (03244) 3-83-76  
e-mail: administrator@pedro.uar.net*

On the basis of the solution of Poisson's equation the explicit form of potential energy of the charged particle for the complex spherical nanosystem as a function of the distance to the common centre of the spherical surfaces ( $r$ ) was determined. The general analysis of the potentials was performed in three cases, when  $r < a$ ,  $a < r < b$ ,  $b < r$  ( $a, b$  being the radii of interfaces). The energy of the point charge which is in the internal layer of the system was established. Its dependence on the radius of the layer and on the choice of different trial wave functions was analysed.