ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 3, № 2 (1999) с. 187–191
JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 3, No. 2 (1999) p. 187–191

ВПЛИВ СИЛ ЗОБРАЖЕНЬ НА ЕНЕРҐЕТИЧНИЙ СПЕКТР ЕЛЕКТРОНА В СКЛАДНОМУ СФЕРИЧНОМУ МІКРОКРИСТАЛІ CdS/β–HgS/H_2O

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 потенціяльної енергії зарядженої частинки для складної сферичної наносистеми як функції відстані до спільного центра сферичних поверхонь (r). Проведено загальний аналіз потенціялів 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, потенціяльна енергія, пробна хвильова функція.

PACS numbers: 73.20.–r.

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].

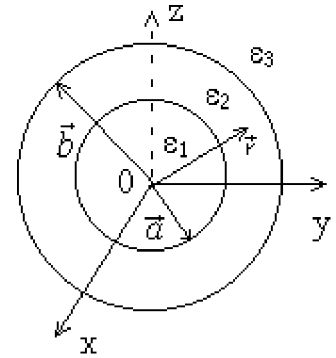

Рис. 1. Модель сферичної гетеросистеми.

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

У роботі [2] вперше знайдено вигляд потенціялу 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, $a_h = \frac{\varepsilon\hbar^2}{m_h e^2}$, $a_e = \frac{\varepsilon\hbar^2}{m_e e^2}$, $a_{ex} = \frac{\varepsilon\hbar^2}{\mu e^2}$, — борівські радіуси дірки, електрона, екситона відповідно, a — радіус нанокристала.

Метою нашої роботи є розрахунок потенціялу сил зображень для складної сферичної наноструктури, у якій кулястий кристал охоплений шаром іншого напівпровідника. На основі отриманого потенціялу знайдено енергію зарядженої частинки, що знаходиться у внутрішньому шарі системи CdS/β–HgS/H_2O.

I. ПОТЕНЦІЯЛ ЗАРЯДУ ВСЕРЕДИНІ І ЗОВНІ СКЛАДНОГО НАНОКРИСТАЛА

Розглядаємо складну сферичну гетеросистему, яка зображена на рис. 1. (радіус нанокристала з діелектричною проникністю ε_1 дорівнює a, а зовнішній радіус напіпровідникового шару з діелектричною проникністю ε_2 дорівнює b). Уся ця двошарова наносистема поміщена в матрицю з діелектричною проникністю ε_3.

Унаслідок сферичної симетрії системи, задачу про знаходження потенціялу 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 неперервности потенціялу і нормальної складової вектора індукції для електростатичного поля. Функцію $\varphi = \varphi(\mathbf{r})$ зручно подати у вигляді:

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

φ_1, φ_2, φ_3 — є розв'язки рівнянь Пуассона чи Лапласа. Зокрема для випадку, коли частинка знаходиться у внутрішньому шарі ($r_0 < a$), одержано:

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

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

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

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

$P_n(x)$ — 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 δ_{3b} на межах середовищ. Енергію взаємодії заряду в точці $\mathbf{r}$ із зв'язаними зарядами на межах поділу визначаємо формулою:

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

Після відповідних перетворень одержано, що потенціяльна енерґія заряду може бути записана у вигляді:

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

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

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

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

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

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

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

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 енерґія 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 енерґію системи. Крім них, потенціяльна енерґія заряду містить, як і в [2], одну чи дві гіпергеометричні функції. Наявність двох меж поділу відбилась у потенціялах на тому, що, крім згаданих доданків, виникають ще швидкозбіжні ряди ("залишкові" доданки), які не вдається виразити через відомі функції.

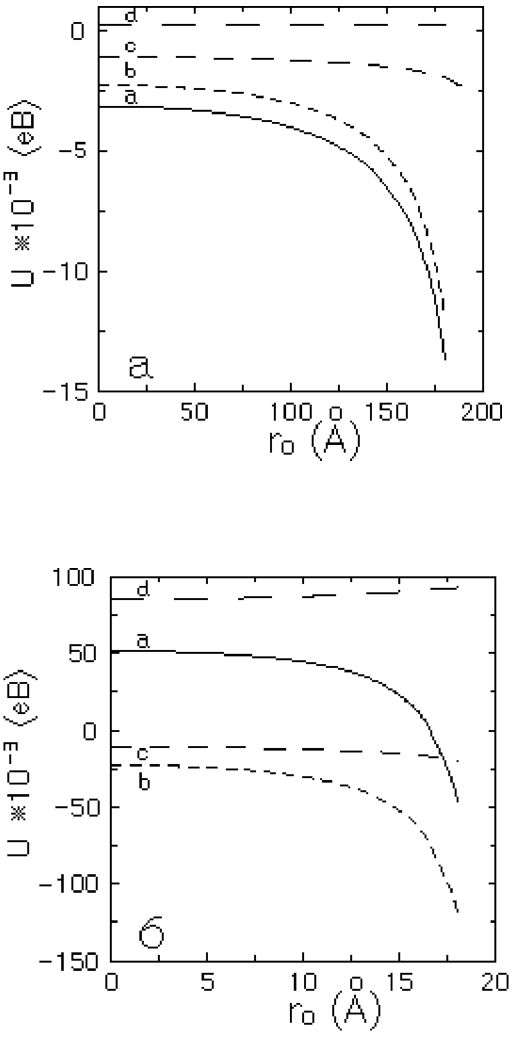

Рис. 2. Залежність потенціяльної енерґії від відстані заряду до центра системи ($0 < r_0 < a$) для структури CdS/β–HgS/H_2O: а) $a = 0.2 \times 10^3$ Å, $b = 1.5 \times 10^4$ Å; б) $a = 20$ Å, $b = 40$ Å; крива а — повна енерґія системи; крива b — вклад кулонівського доданка; крива с — вклад гіпергеометричної функції; крива d — вклад "залишкового" доданка.

II. ЕНЕРҐІЯ ЧАСТИНКИ У ВНУТРІШНЬОМУ ШАРІ

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

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

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:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2}R_0(r)+U_i(r)\right)\psi_0(r)=ER_0(r).$$

Аналіз залежности $U_i = U_i(r)$ дає змогу встановити внесок кожного доданка функції. На рис. 2а подано результати обчислень функції $U_i(r)$ для структури CdS/β–HgS/H_2O, 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 потенціялу простого кулястого мікрокристала [2]. Видно, що внесок кулонівського потенціялу є основним, а "залишковий" доданок дає незначний вклад і в граничному випадку, коли $b \to \infty$, перетворюється в нуль. Урахування гіпергеометричної функції веде до збільшення значень потенціялу при малих r і деякої зміни залежности від радіуса, коли r близьке до a.

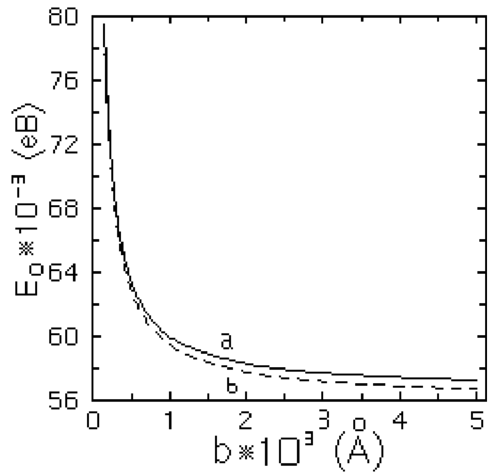

Рис. 3. Залежність повної енерґії заряду від радіуса проміжного шару b ($a = 50$ Å): крива а відповідає за вибір хвильової функції у вигляді R_0'', крива b — у вигляді R_0'.

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 варіяційний метод. Пробну хвильову функцію вибирали 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 α — варіяційний параметр. При виборі пробних функцій враховували, що хвильова функція в точках $r = 0$, $r = a$ повинна дорівнювати нулеві. Згідно з варіяційним методом енерґію 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 енерґій 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 енерґій заряду для різних значень проміжного шару b (нанокристала β–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 потенціяльної енерґії зарядженої частинки для складної сферичної наносистеми від відстані до спільного центра сферичних поверхонь. Проведено загальний аналіз потенціялів у трьох випадках, коли $r < a$, $a < r < b$, $b < r$. Знайдено також енерґію зарядженої частинки, що знаходиться у внутрішньому шарі кристала і проведено аналіз залежности її від розмірів шарів та вибору різних хвильових функцій.

a, 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 енерґії 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/β–HgS/H_2O

V. I. Boichuk, R. Yu. Kubay, I. V. Bilynskii
Ivan Franko Drogobych 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 perfomed 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.