

## СПЕКТРИ ЕЛЕКТРОНІВ І ДІРОК У СФЕРИЧНИХ НАНОГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

М. В. Ткач, В. А. Головацький, О. М. Войцехівська, М. Я. Міхальова, Р. Б. Фартушинський  
Чернівецький державний університет  
вул. Коцюбинського, 2, Чернівці, 58012, Україна  
(Отримано 6 травня 2000 р.)

У наближенні ефективних мас виконано теоретичне дослідження спектрів електронів та дірок у різних сферичних наногетероструктурах. Установлено залежності енергій квазічастинок від розмірів кожного із шарів наносистеми. Розраховано енергію екситонного збудження у сферичній наногетеросистемі CdS/HgS/CdS/H<sub>2</sub>O та проведено порівняння отриманих результатів з експериментальними даними.

**Ключові слова:** електрон, дірка, екситон, наногетеросистема.

PACS number(s): 79.60.Gv

### І. ВСТУП

Теорію дискретного спектра та хвильових функцій електронів і дірок у закритих сферичних наногетеросистемах розвинуто в працях [1–3]. Вивчено також електронний спектр [3] і взаємодію електронів та дірок з фононами [1].

Прикладом реальних квантово-точкових наносистем є експериментально створені [5,6] структури, що складаються з ядра CdS, шару HgS та ще одного шару CdS, розташованих у воді. Такі складні квантові точки (КТ) були створені у воді під високим тиском методом йонного заміщення [5]. В експериментальних умовах елементарні комірки CdS та HgS виявились кубічної ( $\beta$ ) модифікації зі структурою цинкової обманки, показаної на рис. 1. Розміри елементарних комірок обох кристалів (таблиці 1) відрізняються лише на 0.6 %, що є сприятливим для застосування моделі прямокутного потенціалу для електрона й дірки.

У праці [5] порівнювали результати теоретичного розрахунку й експериментально отриманого екситонного спектра для наносистем CdS/HgS/CdS/H<sub>2</sub>O. Теорію будували на тому, що КТ вважалися сферичними. Використано наближення ефективних мас для електрона й дірки та модель сферичних прямокутних потенціалів скінченної величини для обох квазічастинок. Хоча у праці стверджувалось про добре узгодження теорії та експерименту, однак залишається незрозумілим питання про те, як експериментально вимірювали розміри складових КТ.

Питання про форму та розміри складних КТ CdS/HgS/CdS детально вивчено у праці [6], де за до-

помогою тунельного електронного мікроскопа з високою роздільною здатністю було показано, що початкова КТ —  $\beta$ CdS — має форму, близьку до тетраедра з висотою основної грані близько  $\sim 50$  Å. Наступне експериментальне нарощування кількох шарів HgS чи CdS зберігало форму, близьку до тетраедра, хоча деякі КТ мали й нететрагональну форму.

Мета цієї роботи: а) детальний аналіз властивостей спектрів і хвильових функцій електрона й дірки у сферичних КТ з кількома шарами (чого не зроблено в попередніх працях); б) розрахунок екситонного спектра реальної системи  $\beta$ -CdS/HgS/CdS/H<sub>2</sub>O на основі уточненої апроксимувальної моделі сферичних складових КТ.

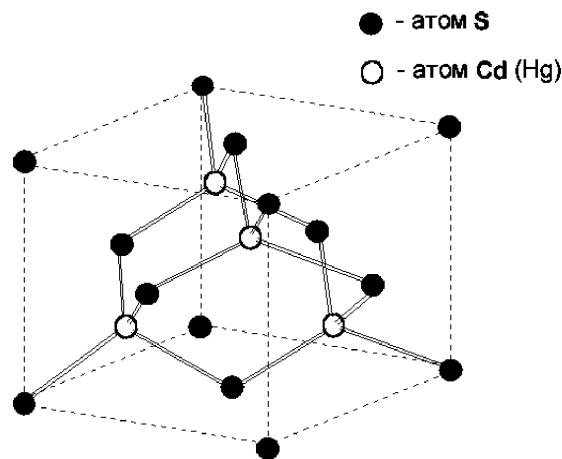


Рис. 1. Структура елементарної комірки CdS (HgS).

середовище	a (Å)	$m_e$	$m_h$	$E_g$ (eV)	$U_e$ (eV)	$U_h$ (eV)	$\epsilon_\alpha^0$	$\epsilon_\alpha^\infty$
CdS	5.818	0.2	0.7	2.5	1.35	0.65	9.1	5.5
HgS	5.851	0.036	0.044	0.5	0	0	18.2	11.36
H <sub>2</sub> O	—	1	$\infty$	—	3.85	$\infty$	81	1.78

Таблиця 1. Параметри матеріалів.

## II. СПЕКТР ТА ХВИЛЬОВІ ФУНКЦІЇ ЕЛЕКТРОНА, ДІРКИ Й ЕКСИТОНА У СКЛАДНІЙ СФЕРИЧНІЙ КТ

Вивчатимемо закриту сферичну наногетеросистему, що складається з ядра (0) та двох шарів ( $N = 2$ ), які розташовані в зовнішньому середовищі (3), де величини потенціальних енергій ( $\max U$ ) як для електрона, так і для дірки є найбільшими. Така система дозволяє розглянути й часткові випадки (реалізовані експериментально), коли розміри її окремих елементів прямують до нуля або до безмежності. Просторову схему та потенціальні енергії електрона й дірки в частковому випадку для наносистеми CdS/HgS/CdS/H<sub>2</sub>O подано на рис. 2.

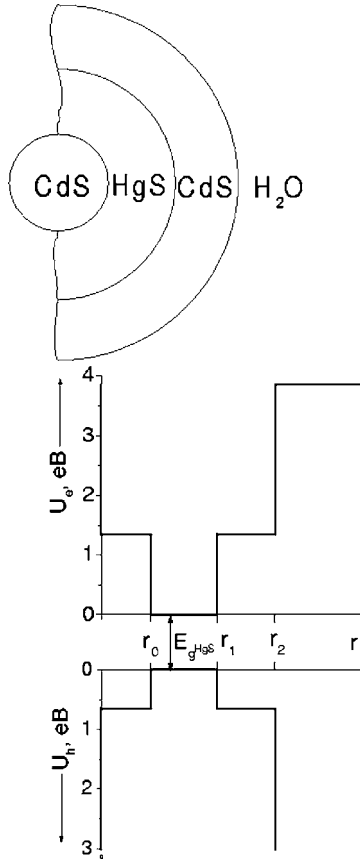


Рис. 2. Геометрична та енергетична схеми наногетеросистеми CdS/HgS/CdS/H<sub>2</sub>O.

### A. Спектр і хвильові функції електрона й дірки

Оскільки аналітичні розрахунки для електрона й дірки є однаковими, то далі, для конкретності, розглядатимемо електрон. Отже, у загальному випадку

двошарової ( $N = 2$ ) наносистеми вважається відомою ефективна маса

$$m_e(r) = \sum_{i=0}^3 m_e^i \sigma(r - r_i), \quad (1)$$

$$\sigma(r - r_i) = \begin{cases} 1, & r_{i-1} < r < r_i, (r_{-1} \equiv 0); \\ 0, & \text{в іншій ділянці,} \end{cases}$$

та потенціальна енергія електрона, відрахована від дна найглибшої потенціальної ями

$$V_e(r) = \sum_{i=0}^3 V_e^i \sigma(r - r_i). \quad (2)$$

Як відомо з загальної теорії, розв'язками рівняння Шредингера з гамільтонієм

$$\hat{H}_e = -\frac{\hbar}{2} \nabla \frac{1}{m_e(r)} \nabla + V_e(r) \quad (3)$$

у ділянці  $E < V_e^3$  є функції

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (4)$$

Тут  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  — сферичні функції, а

$$R_{nl}(r) = A \{ J_l(Kr) \sigma(r - r_0) + \alpha_3^l h_l^+(ikr) \sigma(r - r_2) + \sum_{i=1}^2 (\alpha_i^l J_l(K_i r) + \beta_i^l N_l(K_i r)) \sigma(r - r_i) \} \quad (5)$$

— радіальні функції, які є лінійними комбінаціями сферичних функцій Бесселя, Неймана та Ханкеля, що задовольняють умови неперервності густини та її потоку на всіх межах системи. При цьому

$$J_l(K_i r) = \begin{cases} j_l(k_i r), & V_i \leq E \\ h_l^+(ik_i r), & V_i > E \end{cases}, \quad (6)$$

$$N_l(K_i r) = \begin{cases} n_l(k_i r), & V_i \leq E \\ h_l^-(ik_i r), & V_i > E \end{cases},$$

де

$$K_i = \begin{cases} k_i = \hbar^{-1} \sqrt{2m_i(E - V_i)}, & V_i \leq E \\ ik_i = \hbar^{-1} \sqrt{2m_i(V_i - E)}, & V_i > E \end{cases}, \quad (7)$$

Спектр дискретних енергій, які відповідають зв'язаним стаціонарним станам електрона, визначається дисперсійними рівняннями

$$\frac{m_1 J_l(K_1 r_1) W_1 - m_2 J'_l(K_1 r_1) W_2}{m_1 N_l(K_1 r_1) W_1 - m_2 N'_l(K_1 r_1) W_2} = \frac{m_0 J_l(K_0 r_0) J'_l(K_0 r_0) - m_1 J'_l(K_0 r_0) J_l(K_0 r_0)}{m_0 J_l(K_0 r_0) N'_l(K_0 r_0) - m_1 J'_l(K_0 r_0) N_l(K_0 r_0)}, \quad (8)$$

де

$$W_1 = J_l(K_1 r_1) - N_l(K_1 r_1) Q_l(K_2 r_2), \quad W_2 = J'_l(K_1 r_1) - N_l(K_1 r_1) Q_l(K_2 r_2), \quad (9)$$

$$Q_l(K_2 r_2) = \frac{m_2 h_l^{l+}(i\kappa_3 r_2) J_l(K_2 r_2) - m_3 h_l^+(i\kappa_3 r_2) J'_l(K_2 r_2)}{m_2 h_l^{l+}(i\kappa_3 r_2) N_l(K_2 r_2) - m_3 h_l^+(i\kappa_3 r_2) N'_l(K_2 r_2)}.$$

При заданому квантовому числі  $l = 1, 2, \dots, \infty$  рівняння (8) може мати (або не мати) відповідне число ( $n = 1, \dots, n_{max}$ ) розв'язків ( $E_{nl}^e$ ), які визначають енергетичні рівні зв'язаних станів електрона.

Коефіцієнти  $\alpha_1^l, \alpha_2^l, \beta_1^l, \beta_2^l, \beta_3^l$  однозначно визначаються з умов неперервності і мають вигляд

$$\left. \begin{aligned} \alpha_1^l &= D_l^{-1}(K_0 r_0) [j_l(K_0 r_0) N'_l(K_0 r_0) - \frac{m_1}{m_0} N_l(K_0 r_0) j'_l(K_0 r_0)], \\ \beta_1^l &= D_l^{-1}(K_0 r_0) [-j_l(K_0 r_0) J'_l(K_0 r_0) + \frac{m_1}{m_0} J_l(K_0 r_0) j'_l(K_0 r_0)], \\ \alpha_2^l &= D_l^{-1}(K_1 r_1) [C_l(K_1 r_1) N'_l(K_1 r_1) - \frac{m_2}{m_1} N_l(K_1 r_1) C'_l(K_1 r_1)], \\ \beta_2^l &= D_l^{-1}(K_1 r_1) [-C_l(K_1 r_1) J'_l(K_1 r_1) + \frac{m_2}{m_1} J_l(K_1 r_1) C'_l(K_1 r_1)], \\ \alpha_3^l &= [h_l^+(i\kappa_3 r_2)]^{-1} [\alpha_2^l J_l(K_2 r_2) + \beta_2^l N_l(K_2 r_2)], \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

де

$$D_l(K_i r_i) = J_l(K_i r_i) N'_l(K_i r_i) - N_l(K_i r_i) J'_l(K_i r_i),$$

$$C_l(K_i r_i) = \alpha_1^l J_l(K_1 r_1) + \beta_1^l N_1^l(K_1 r_1). \quad (11)$$

Нарешті, коефіцієнти  $A_l$  визначаються з умови нормування

$$A_l = \left\{ \int_0^{r_0} r^2 j_l^2(K_0 r) dr + \int_{r_0}^{r_1} r^2 |\alpha_1^l J_l(K_1 r) \beta_1^l N_l(K_1 r)|^2 dr \right. \quad (12)$$

$$\left. + \int_{r_1}^{r_2} r^2 |\alpha_2^l J_l(K_2 r) + \beta_2^l N_l(K_2 r)|^2 dr + \int_{r_2}^{\infty} r^2 |\alpha_3^l h_l^+(i\kappa_3 r)|^2 dr \right\}^{-\frac{1}{2}}.$$

Таким чином, енергетичний спектр і хвильові функції електрона у зв'язаних стаціонарних станах сферичної наногетеросистеми, що складається з ядра і двох шарів у середовищі, цілком визначений. Аналогічно визначається спектр  $E_{nl}^h$  та хвильові функції  $\psi_h(\mathbf{r})$  дірки.

## В. Спектр зв'язаного екситона з електроном і діркою у симетричних станах

Гамільтоніян екситона у сферичній наногетеросистемі має вигляд

$$\hat{H}_{ex}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \hat{H}_e(\mathbf{r}_e) + \hat{H}_h(\mathbf{r}_h) - \frac{e^2}{\epsilon |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|}. \quad (13)$$

Тут  $\hat{H}_e$ ,  $\hat{H}_h$  — гамільтоніани неваємодіючих між собою електрона (3) й дірки, а останній доданок відповідає потенціалній енергії взаємодії електрона й дірки. Діелектрична проникливість системи ( $\epsilon$ ) є складною функцією координат електрона й дірки, яка у спрощеному вигляді визначається співвідношенням

$$\frac{1}{\epsilon} = \sum_{i=0}^3 \frac{P_e^i P_h^i}{\epsilon_i}, \quad (14)$$

де

$$P_{e,h}^i = \int_{r_{i-1}}^{r_i} r^2 |R_{e,h}^i(r)|^2 dr \quad (15)$$

— імовірність перебування електрона ( $e$ ) чи дірки ( $h$ ) у  $i$ -му шарі системи.

Рівняння Шредингера

$$\hat{H}_{ex}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) \psi_{ex}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = E \psi_{ex}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) \quad (16)$$

з гамільтоніаном (13) у загальному вигляді точно не розв'язується, тому для цього застосовується або прямий варіаційний метод Рітца, або метод теорії збурень. Останній дає добрі результати тоді, коли відповідні поправки до енергії значно менші, ніж різниця енергій двох сусідніх станів електрона чи дірки, в яких перебувають обидві квазічастинки, що утворюють екситон.

Згідно з методом теорії збурень, хвильову функцію екситона в основному стані можна подати у вигляді

$$\psi_{ex}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \psi_{100}(\mathbf{r}_e) \psi_{100}(\mathbf{r}_h), \quad (17)$$

де

$$\psi_{100}(\mathbf{r}_{e,h}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{10}(r_{e,h}) \quad (18)$$

— нормована хвильова функція неваємодіючих електрона ( $e$ ) і дірки ( $h$ ) в основному стані ( $l = m = 0$ ), Енергія екситонного збудження в цьому наближенні буде

$$E = E_{1s} - E_{зв}, \quad (E_{1s} = E_g + E_{10}^e + E_{10}^h), \quad (19)$$

де  $E_g$  — енергія забороненої зони кристала, який створив найбільші потенціалні ями для електрона й дірки в наногетеросистемі,  $E_{10}^e$  — енергія електрона, відрахована від дна зони провідності вгору,  $E_{10}^h$  — енергія дірки, відрахована від верху валентної зони вниз,  $E_{зв}$  — енергія зв'язку екситона

$$E_{зв} = \int \int |\psi_{100}(\mathbf{r}_e)|^2 |\psi_{100}(\mathbf{r}_h)|^2 \frac{\epsilon^2}{\epsilon |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} d^3 \mathbf{r}_e d^3 \mathbf{r}_h. \quad (20)$$

Користуючись розкладом

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \theta) \begin{cases} r_e^l r_h^{-(l+1)}, & r_e \leq r_h; \\ r_h^l r_e^{-(l+1)}, & r_e \geq r_h, \end{cases} \quad (21)$$

де  $\theta$  — кут між векторами  $\mathbf{r}_e$  і  $\mathbf{r}_h$ , та виконавши інтегрування за всіма кутовими змінними у виразі (20), одержимо

$$E_{зв} = \frac{e^2}{\epsilon} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{r_e^2 r_h^2 |R_{10}(r_e)|^2 |R_{10}(r_h)|^2}{\max(r_e, r_h)} dr_e dr_h. \quad (22)$$

Таким чином визначено енергію і хвильову функцію зв'язаного екситона в основному стані сферичної наногетеросистеми, що складається з ядра і двох шарів у зовнішньому середовищі.

### ІІІ. ВЛАСТИВОСТІ СПЕКТРІВ ЕЛЕКТРОНА Й ДІРКИ В ДЕЯКИХ КТ

Система, що складається з ядра і двох шарів у середовищі, дозволяє вивчати спектри електронів, дірок та екситонів у таких простіших сферичних наногетеросистемах, які є певними граничними випадками загальної. Спектри та хвильові функції квазічастинок у деяких із таких систем далі вивчаємо на основі числових розрахунків.

#### А. Електрон і дірка у сферичній КТ, розташованій у середовищі (на прикладі системи HgS/CdS)

На рис. 3 подано геометричну й енергетичну схеми (а), залежність спектра від радіуса ями (б) та густини ймовірності перебування електрона й дірки в кількох станах (в). З рисунка видно, що властивості спектрів електрона й дірки якісно однакові, а кількісно відрізняються лише тому, що ці квазічастинки мають різні ефективні маси й величини потенціалних енергій. Зі збільшенням радіуса КТ всі рівні електрона зміщуються (приблизно за законом  $r_0^{-2}$ ) до дна потенціальної ями. Спочатку, при деякому  $r_0 \neq 0$ , з'являються рівні серії  $n = 1$  з  $l = 0, 1, 2, \dots$ , потім рівні серії  $n = 2$  з різними  $l$ , далі  $n = 3$  і т.д. Енергетичні рівні різних серій зміщуються, так що при різних значеннях  $nl$  і при деяких значеннях  $r_0$  вони можуть збігатися внаслідок випадкового виродження.

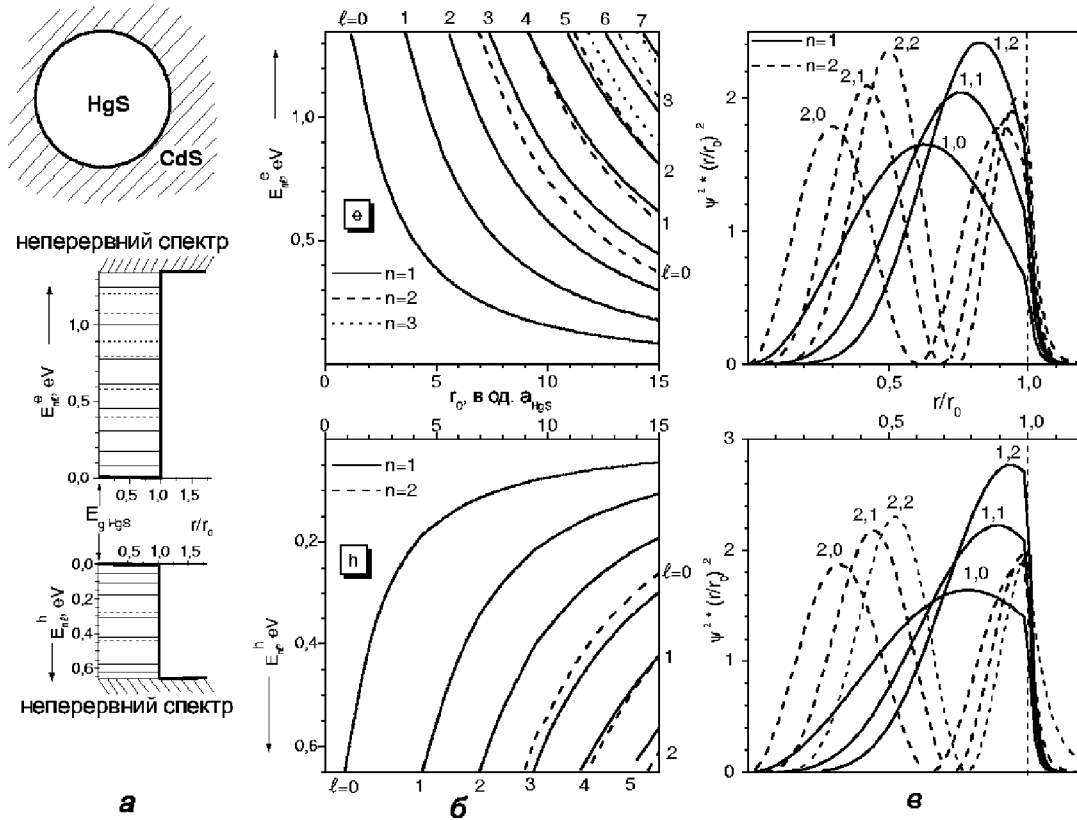


Рис. 3. Геометрична та енергетична схеми сферичної наноструктури CdS/HgS — а); залежність електронного та діркового спектрів від радіуса ями; — б); густини ймовірності знаходження електрона та дірки в станах з  $n = 1, 2$  та  $l = 0, 1, 2$  — в).

З рис. 3в видно, що, внаслідок скінченної величини потенціального бар'єра квазічастинки проникають з ядра в навколишнє середовище. При цьому у всіх станах ймовірність перебування квазічастинки в середовищі швидко спадає з її віддаленням від межі розділу середовищ. При всіх значеннях  $n$  зі збільшенням величини  $l$  максимуми  $\rho$  зміщуються далі від центра системи. Це зрозуміло, оскільки збільшення  $l$  еквівалентне збільшенню орбітального моменту, який і примушує квазічастинку віддалятися від центра системи.

**В. Електрон і дірка у сферичній КТ, що складається з ядра й одного шару у середовищі (на прикладі системи CdS/HgS/H<sub>2</sub>O)**

На рис. 4 подано геометричну й енергетичну схеми а), залежність спектрів електрона й дірки від товщини шару HgS при  $r_0 = 4a_{CdS}$  б), залежності густин ймовірностей перебування електрона й дірки в кількох станах в), залежність спектра електрона від радіуса ядра CdS при  $r_1 - r_0 = 10a_{CdS}$  г). Оскільки повна картина спектра достатньо складна, то для більшої ясності, залежності енергій і густин ймовірностей від геометричних розмірів системи наведені для  $l = 0, 1$  не на одному рисунку, а на різних.

Особливості електронного спектра в гетеросистемі (CdS/HgS/H<sub>2</sub>O) показані на рис. 4. Залежність спектра від товщини шару HgS при фіксованому радіусі внутрішнього кристала CdS якісно однакова для будь-яких значень квантового числа  $l$ . При заданому головному квантовому числі  $n$  у наносистемі фіксованих розмірів зі збільшенням  $l$  енергія електрона ( $E_{nl}$ ) зростає. При заданій величині радіуса внутрішнього кристала (CdS) зі збільшенням кількості моношарів кристала (HgS) всі електронні енергетичні рівні зміщуються до дна глибокої ями. Рівні, що знаходяться в ділянці енергій мілкої ями (CdS), мають немонотонну залежність від товщини оболонки HgS з яскраво вираженим ефектом “пляшкового горла”. Рівні, які знаходяться у глибшій ямі під дном мілкої ями, зі збільшенням товщини шару HgS монотонно зміщуються до дна ями цього нанокристала.

Установлена поведінка електронного чи діркового спектрів зрозуміла з фізичних міркувань. Через те що рух електрона відбувається у двох потенціальних ямах, то кожна з них створює свою систему рівнів. При цьому менш глибока яма CdS фіксованого радіуса ( $r_0 = 4a_{CdS}$ ) за відсутності глибокої ями HgS створювала би спектр, показаний на рис. 4 б) ( $l = 0$ ) штриховими лініями. Глибока яма HgS за відсутності мілкої CdS створювала би спектр, залежність якого від числа моношарів HgS показана на цьому ж ри-

сунку пунктирними лініями. Оскільки ж у розглянутій наносистемі присутні обидві ями одночасно, то, як і у будь-якій складній системі, що містять дві взаємодіючі підсистеми однакової симетрії, в околі енергій, де рівні від обох підсистем зближаються, виникає ефект розштовхування рівнів, який ще називають ефектом “пляшкового горла”. Цим і зумовлена ділянка немонотонного характеру спектра.

Оскільки мілка яма не може створювати ніяких рівнів нижче від свого дна, то природно, що в цій ділянці енергій усі рівні зумовлені лише глибокою ямою HgS, а тому зі збільшенням її товщини всі вони монотонно зміщуються до дна ями.

Поведінка діркового спектра аналогічна до електронного, тільки картина у зрозумілому сенсі є “перевернутою”.

З рис. 4в видно, що внаслідок скінченної величини потенціального бар'єра, квазічастинки проникають з ядра в навколишнє середовище. При цьому у всіх станах ймовірність перебування в середовищі швидко спадає з віддаленням від межі розділу середовищ. При всіх значеннях  $n$  зі збільшенням величини орбітального квантового числа  $l$  максимуми густини ймовірності зміщуються все далі від центра системи, оскільки збільшення  $l$  еквівалентне збільшенню орбі-

тального момента, який і змушує квазічастинку рухатись на більшій відстані від центра системи.

З рис. 4в видно, що при  $n = 1$  і електрон, і дірка найімовірніше знаходяться в шарі HgS (ямі), причому максимум густини ймовірності при більшому значенні  $l$  знаходиться (як і повинно бути) далі від центра наносистеми. У цих станах електрон має дуже малу ймовірність перебування в ядрі (CdS) і в середовищі (H<sub>2</sub>O), а дірка з малою ймовірністю може знаходитися в ядрі (CdS) і не може потрапити в середовище (H<sub>2</sub>O) через безмежний потенціальний бар'єр.

У тих станах з  $n > 1$ , де енергетичні рівні електрона й дірки більші, ніж величина потенціального бар'єра ядра, квазічастинки можуть з великою ймовірністю перебувати в ядрі. З рис. 4в це добре видно на прикладі дірки у станах  $n = 2, l = 0, 1$ , де вона, в основному, знаходиться в ядрі (CdS), а не в ямі (HgS).

З урахуванням встановлених особливостей поведінки електрона й дірки в різних станах виникає практична можливість просторового розділення цих квазічастинок шляхом збудження їх (наприклад, електромагнетним полем) у такі стани, де вони знаходяться у віддалених між собою ділянках наносистеми.

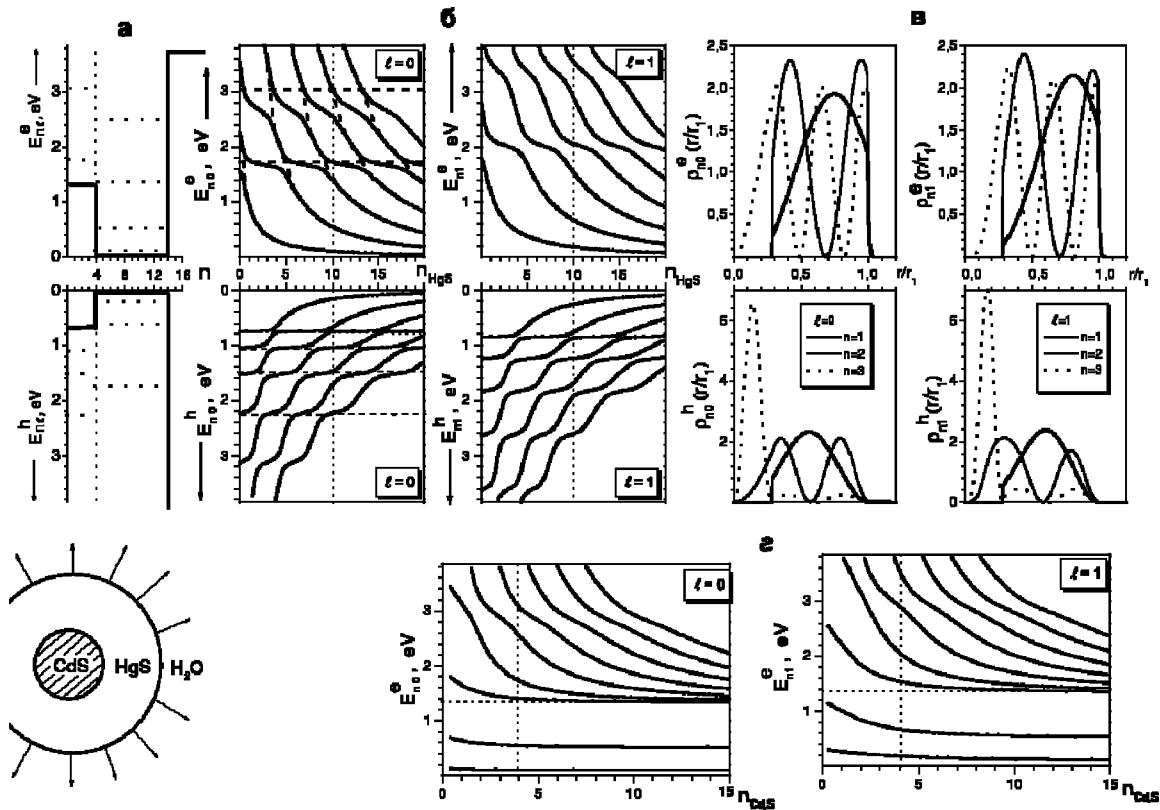


Рис. 4. Геометрична та енергетична схеми сферичної наноструктури CdS/HgS/H<sub>2</sub>O — а); залежність електронного та діркового спектрів від  $n_{\text{HgS}}$  — б); густини ймовірності перебування електрона та дірки в станах з  $n = 1, 2, 3$  та  $l = 0, 1$  — в).

На рис. 4г показано поведінку електронного спектра в системі (HgS/CdS/H<sub>2</sub>O) при фіксованому радіусі ( $r_0 = 15a_{\text{HgS}}$ ) внутрішнього кристала (HgS) залежно від кількості моношарів зовнішнього кристала (CdS). З рисунка видно, що основні риси поведінки спектра такі ж, як і в попередній гетеросистемі, але є дві відмінності. По-перше, менше виражена немонотонність спектра в ділянках її існування, а по-друге, в ділянці енергій між дном мілкої і глибокої ям енергетичні рівні, сформовані глибшою ямою HgS, практично не залежать від товщини мілкої ями CdS.

**С. Спектри електрона, дірки й екситона у складній наносистемі CdS/HgS/CdS/H<sub>2</sub>O**

Особливості поведінки спектрів електрона й дірки залежно від товщин різних шарів сферичної наносис-

теми з  $N = 2$  якісно подібні до системи з  $N = 1$ , тому немає потреби аналізувати їх докладно. Однак варто звернути увагу на залежності від товщин різних шарів КТ енергії збудження ( $E_{1s}$ ) електрона й дірки у 1s стани. На рис. 5а,б,в наведена залежність  $E_{1s}$  від товщин кожного з трьох шарів при фіксованих розмірах двох інших шарів сферичної наносистеми CdS/HgS/CdS/H<sub>2</sub>O. З рис. 5а видно, що при фіксованих розмірах ядра  $n_{\text{CdS}} = 3, 4$  і зовнішнього шару (  $n_{\text{CdS}} = 0 \div 2$  ) залежність  $E_{1s}$  від товщини шару-ями HgS є значною при зміні товщини на кілька моношарів. З рисунка 5б,в видно, що за наявності у складній КТ шару-ями HgS залежність  $E_{1s}$  суттєво змінюється лише зі зміною відповідного шару CdS на величину одного-двох моношарів. При подальшому ж збільшенні товщини  $\Delta$  величина  $E_{1s}$  практично не змінюється.

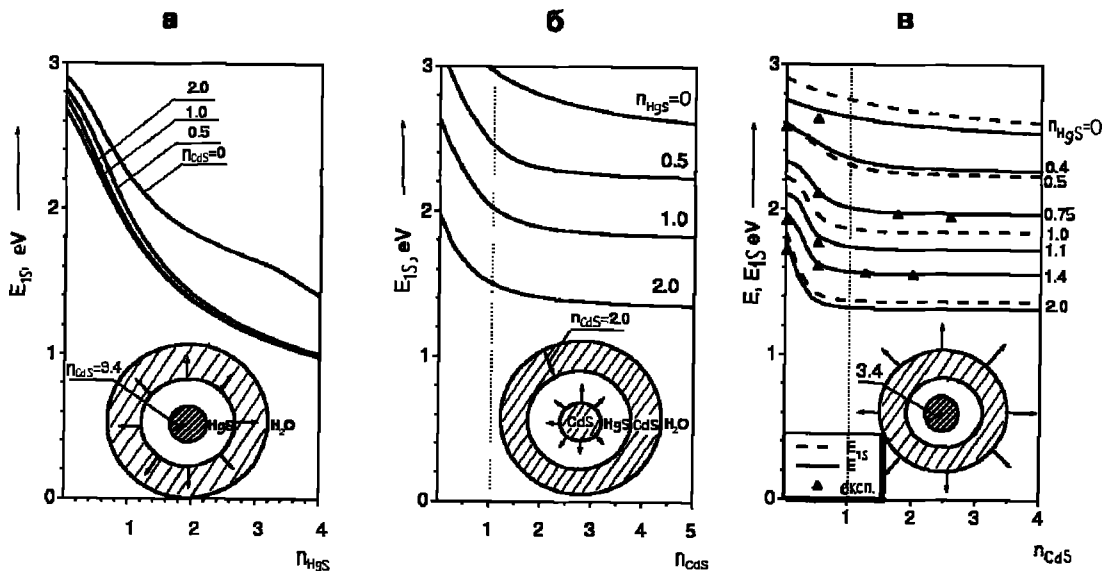


Рис. 5. Залежність енергії  $E_{1s}$  від товщини шару HgS — а) та шарів CdS — б), залежність енергії збудження екситона  $E$  (суцільні лінії), енергії  $E_{1s}$  (штрихові лінії) та експериментальні значення  $E$  з праці [5] (трикутники) — в).

З урахуванням виявлених властивостей спектра електрона й дірки у складних сферичних КТ видається доцільним застосування цієї моделі для розрахунку екситонного спектра в експериментально дослідженій системі CdS/HgS/CdS/H<sub>2</sub>O [5,6] з тим, щоб з порівняння теоретичних та експериментальних результатів отримати інформацію про геометричну форму досліджуваних нанокристалів.

Якби нанокристал був ідеальним тетраедром, то він, оскільки у  $\beta$ -модифікації складається із гранцентрованих кубічних елементарних комірок (рис. 1), повинен би мати форму чотиригранної піраміди із взаємоперпендикулярними бічними гранями, однакові довжини ребер  $a$  яких мусили б бути кратними половині моношару ( $a/2$ ). Довжина кожного з ребер

основи цього тетраедра  $\sqrt{2}a$ , а об'єм  $a^3/6$ .

Апроксимуючи ідеальний тетраедр рівновеликою за об'ємом сферою, отримуємо таке співвідношення для її радіуса:

$$R = a/2\sqrt[3]{\pi}.$$

Якщо вважати, що при рості нанокристала на кожну з його бічних граней осідає шар товщиною  $\Delta$  (яка в ідеалі також має бути кратною півмоношару), то легко розрахувати, що при цьому приріст радіуса ( $\rho$ ) апроксимувальної сфери буде

$$\rho = 3\Delta/2\sqrt[3]{\pi} \approx 1.024\Delta.$$

Результат розрахунку енергії збудження екситона ( $E = E_{1s} - E_{зв}$ ) в наносистемі CdS/HgS/CdS/H<sub>2</sub>O, виконаний на основі моделі апроксимувальних сфер згідно з теорією розділу II, наведено на рис. 5в. Як видно з рис. 5в, експериментальні значення енергії (з праці [5]) мають добре виражену тенденцію розташування в околі теоретичних залежностей  $E$  від  $\Delta_{CdS}$  на тих кривих, які відповідають таким товщинам шару HgS, що не є кратним  $a_{HgS}/2$ ,  $a_{HgS}$  і т.д. Це означає, що в реальному експерименті, описаному у праці [5], складні КТ мали не сферичну і

не ідеально тетраедричну форму. Отримані в цитованій праці складні наносистеми мали радше “квазі-тетраедральну” геометричну форму з потовщеними моношарами HgS. Така геометрія наносистем цілком узгоджується з результатами пізнішого експериментального дослідження, виконаного в праці [6], де за допомогою тунельного мікроскопа було показано (і це добре видно на рисунку [6]), що нанокристали CdS/HgS/CdS є утвореннями тетраедрального типу з деформованими бічними поверхнями.

[1] Н. В. Ткач, Физ. тверд. тела **39**, 6, 1109 (1997).

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

[3] М. В. Ткач, В. А. Головацький, О. М. Войцехівська, М. Я. Мінькова Укр. фіз. журн. **5**, 617 (1998).

[4] C. W. Bryant, Phys. Rev. B **24**, 16997 (1995).

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

[6] A. Mews, A. V. Kadavanich, U. Banin, A. P. Alivisatos, Phys. Rev. B **20**, 13242 (1996).

#### ELECTRON AND HOLE SPECTRA IN COMPLICATED SPHERICAL NANOHETEROSYSTEMS

M. Tkach, V. Holovatsky, O. Voitsekhivska, M. Mikhalyova, R. Fartushynsky  
Chernivtsi State University, Department of Theoretical Physics,  
2 Kotsubinsky Str., Chernivtsi, UA-58012, Ukraine

Theoretical investigation of electron and hole spectra of different spherical nanoheterostructures is performed within the effective mass approximation. The quasiparticles energies dependences on the sizes of every nanosystem shell are established. The energy of exciton excitement in CdS/HgS/CdS/H<sub>2</sub>O spherical nanoheterosystem is calculated. The obtained results are compared with the experimental data.