JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 4, No. 3 (2000) p. 342–349

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 енерґій квазічастинок від розмірів кожного із шарів наносистеми. Розраховано енерґію екситонного збудження у сферичній наногетеросистемі CdS/HgS/CdS/H_2O та проведено порівняння отриманих результатів з експериментальними даними.

Ключові слова: електрон, дірка, екситон, наногетеросистема.

PACS number(s): 79.60.Gv

I. 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 (β) 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 потенціялу для електрона й дірки.

У праці [5] порівнювали результати теоретичного розрахунку й експериментально отриманого екситонного спектра для наносистем CdS/HgS/CdS/H_2O. Теорію будували на тому, що КТ вважалися сферичними. Використано наближення ефективних мас для електрона й дірки та модель сферичних прямокутних потенціялів скінченої 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 допомогою тунельного електронного мікроскопа з високою роздільною здатністю було показано, що початкова КТ — βCdS — має форму, близьку до тетраедра з висотою основної грані близько ~ 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 β–CdS/HgS/CdS/H_2O на основі уточненої апроксимувальної моделі сферичних складових КТ.

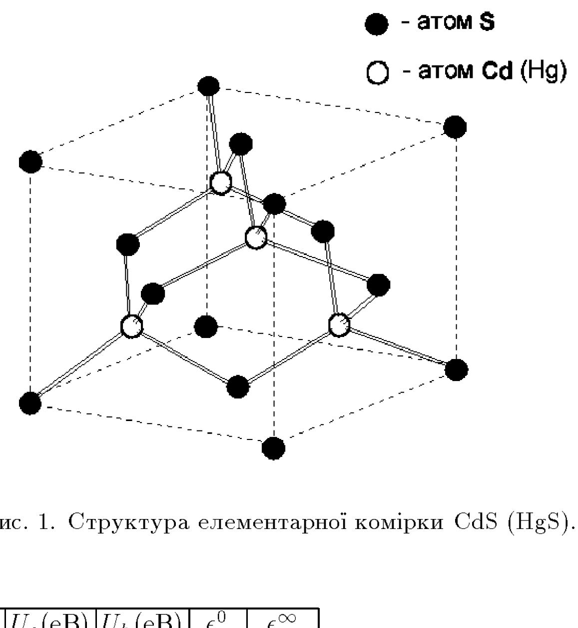

Рис. 1. Структура елементарної комірки CdS (HgS).

середовище	a (Å)	m_e	m_h	E_g(еВ)	U_e(еВ)	U_h(еВ)	ϵ_α^0	ϵ_α^∞
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_2O	—	1	∞	—	3.85	∞	81	1.78

Таблиця 1. Параметри матеріялів.

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 потенціяльних енерґій ($\max U$) 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 безмежности. Просторову схему та потенціяльні енерґії електрона й дірки в частковому випадку для наносистеми CdS/HgS/CdS/H_2O подано на рис. 2.

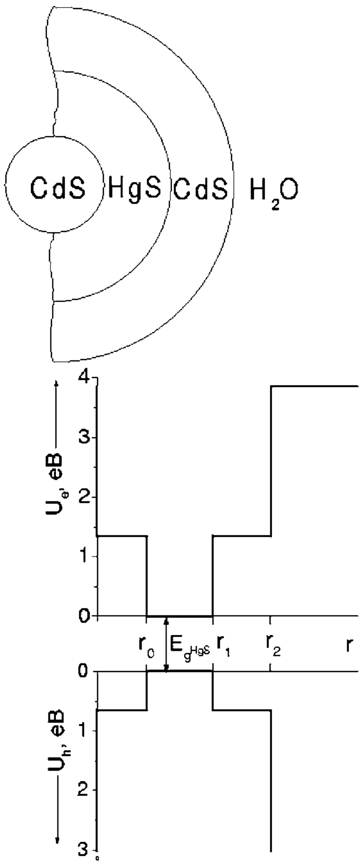

Рис. 2. Геометрична та енерґетична схеми наногетеросистеми CdS/HgS/CdS/H_2O.

А. Спектр і хвильові функції електрона й дірки

Оскільки аналітичні розрахунки для електрона й дірки є однаковими, то далі, для конкретности, розглядатимемо електрон. Отже, у загальному випадку двошарової ($N = 2$) наносистеми вважається відомою ефективна маса

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

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

та потенціяльна енерґія електрона, відрахована від дна найглибшої потенціяльної ями

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

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

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

у ділянці $E < V_e^3$ є функції

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

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

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

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

$$J_l(K_i r) = \begin{cases} j_l(k_i r), & V_i \le E \\ h_l^+(i\kappa_i r), & V_i > E \end{cases},$$

$$N_l(K_i r) = \begin{cases} n_l(k_i r), & V_i \le E \\ h_l^-(i\kappa_i r), & V_i > E \end{cases}, \tag{6}$$

де

$$K_i = \begin{cases} k_i = \hbar^{-1}\sqrt{2m_i(E - V_i)}, & V_i \le E \\ i\kappa_i = \hbar^{-1}\sqrt{2m_i(V_i - E)}, & V_i > E \end{cases}, \tag{7}$$

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

$$\frac{m_1 J_l(K_1r_1)W_1 - m_2 J'_l(K_1r_1)W_2}{m_1 N_l(K_1r_1)W_1 - m_2 N'_l(K_1r_1)W_2} = \frac{m_0 J_l(K_0r_0)J'_l(K_0r_0) - m_1 J'_l(K_0r_0)J_l(K_0r_0)}{m_0 J_l(K_0r_0)N'_l(K_0r_0) - m_1 J'_l(K_0r_0)N_l(K_0r_0)}, \tag{8}$$

де

$$\begin{gathered} W_1 = J_l(K_1r_1) - N_l(K_1r_1)Q_l(K_2r_2), \qquad W_2 = J'_l(K_1r_1) - N_l(K_1r_1)Q_l(K_2r_2), \\ Q_l(K_2r_2) = \frac{m_2 h_l'^{+}(i\kappa_3r_2)J_l(K_2r_2) - m_3 h_l^{+}(i\kappa_3r_2)J'_l(K_2r_2)}{m_2 h_l'^{+}(i\kappa_3r_2)N_l(K_2r_2) - m_3 h_l^{+}(i\kappa_3r_2)N'_l(K_2r_2)}. \end{gathered} \tag{9}$$

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

Коефіцієнти $\alpha^l_1, \alpha^l_2, \beta^l_1, \beta^l_2, \beta^l_3$ однозначно визначаються з умов неперервности і мають вигляд

$$\left.\begin{aligned} \alpha^l_1 &= D^{-1}_l(K_0r_0)[j_l(K_0r_0)N'_l(K_0r_0) - \frac{m_1}{m_0}N_l(K_0r_0)j'_l(K_0r_0)], \\ \beta^l_1 &= D^{-1}_l(K_0r_0)[-j_l(K_0r_0)J'_l(K_0r_0) + \frac{m_1}{m_0}J_l(K_0r_0)j'_l(K_0r_0)], \\ \alpha^l_2 &= D^{-1}_l(K_1r_1)[\mathrm{C}_l(K_1r_1)N'_l(K_1r_1) - \frac{m_2}{m_1}N_l(K_1r_1)\mathrm{C}'_l(K_1r_1)], \\ \beta^l_2 &= D^{-1}_l(K_1r_1)[-\mathrm{C}_l(K_1r_1)J'_l(K_1r_1) + \frac{m_2}{m_1}J_l(K_1r_1)\mathrm{C}'_l(K_1r_1)], \\ \alpha^l_3 &= [h^{+}_l(i\kappa_3r_2)]^{-1}[\alpha^l_2J_l(K_2r_2) + \beta^l_2N_l(K_2r_2), \end{aligned}\right\} \tag{10}$$

де

$$\begin{aligned} D_l(K_ir_i) &= J_l(K_ir_i)N'_l(K_ir_i) - N_l(K_ir_i)J'_l(K_ir_i), \\ \mathrm{C}_l(K_ir_i) &= \alpha^l_1J_l(K_1r_1) + \beta^l_1N^l_1(K_1r_1). \end{aligned} \tag{11}$$

Нарешті, коефіцієнти A_l визначаються з умови нормування

$$A_l = \left\{ \int\limits_0^{r_0} r^2 j^2_l(K_0r)dr + \int\limits_{r_0}^{r_1} r^2|\alpha^l_1J_l(K_1r)\beta^l_1N_l(K_1r)|^2dr \right. \tag{12}$$

$$\left. + \int\limits_{r_1}^{r_2} r^2 \left|\alpha^l_2J_l(K_2r) + \beta^l_2N_l(K_2r)|^2dr + \int\limits_{r_2}^{\infty} r^2|\alpha^l_3h^{+}_l(i\kappa_3r)\right|^2 dr \right\}^{-\frac{1}{2}}.$$

Таким чином, енерґетичний 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^h_{nl} 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

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

Тут $\hat{H}_e$, $\hat{H}_h$ — гамільтоніяни невзаємодіючих між собою електрона (3) й дірки, а останній доданок відповідає потенціяльній енерґії взаємодії електрона й дірки. Діелектрична проникливість системи (ϵ) є складною функцією координат електрона й дірки, яка у спрощеному вигляді визначається співвідношенням

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

де

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

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

Рівняння Шрединґера

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

з гамільтоніяном (13) у загальному вигляді точно не розв'язується, тому для цього застосовується або прямий варіяційний метод Рітца, або метод теорії збурень. Останній дає добрі результаті тоді, коли відповідні поправки до енерґії значно менші, ніж різниця енерґій 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

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

де

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

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

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

де E_g — енерґія забороненої зони кристала, який створив найглибші потенціяльні ями для електрона й дірки в наногетеросистемі, E_{10}^e — енерґія електрона, відрахована від дна зони провідности вверх, E_{10}^h — енерґія дірки, відрахована від верху валентної зони вниз, $E_{\text{зв}}$ — енерґія зв'язку екситона

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

Користуючись розкладом

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

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

$$E_{\text{зв}} = \frac{e^2}{\epsilon} \int\limits_0^\infty \int\limits_0^\infty \frac{r_e^2 r_h^2 |R_{10}(r_e)|^2 |R_{10}(r_h)|^2}{max(r_e, r_h)} dr_e dr_h. \tag{22}$$

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

III. 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.

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

На рис. 3 подано геометричну й енерґетичну схеми (а), залежність спектра від радіуса ями (б) та густини ймовірности 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 потенціяльних енерґій. Зі збільшенням радіуса КТ всі рівні електрона зміщуються (приблизно за законом r_0^{-2}) до дна потенціяльної ями. Спочатку, при деякому $r_0 \neq 0$, з'являються рівні серії $n = 1$ з $l = 0,\ 1,\ 2, \ldots$, потім рівні серії $n = 2$ з різними l, далі $n = 3$ і т.д. Енреґетичні рівні різних серій зміщуються, так що при різних значеннях nl і при деяких значеннях r_0 вони можуть збігатися внаслідок випадкового виродження.

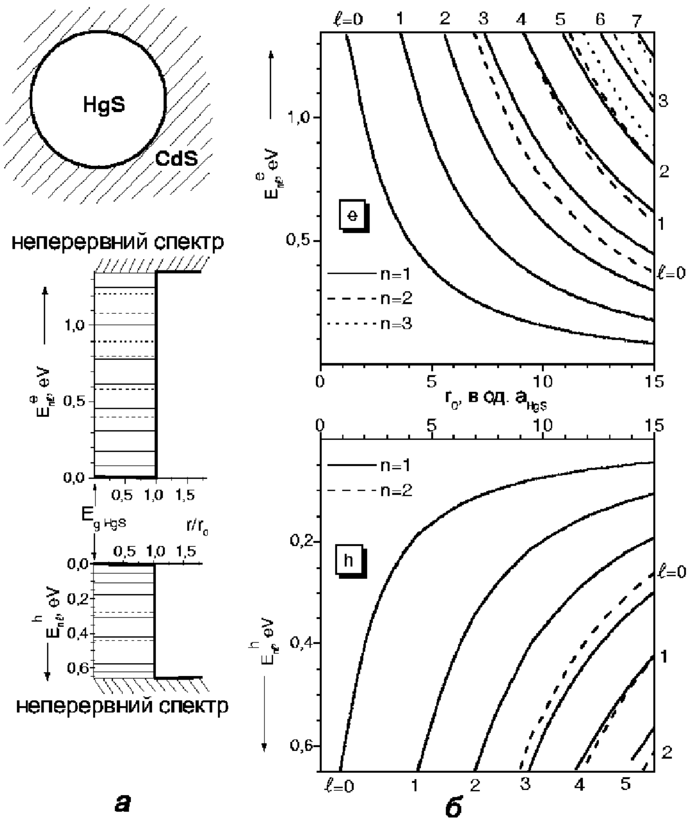

Рис. 3. Геометрична та енерґетична схеми сферичної наноструктури CdS/HgS — а); залежність електронного та діркового спектрів від радіуса ями; — б); густини ймовірности знаходження електрона та дірки в станах з $n = 1,\ 2$ та $l = 0,\ 1,\ 2$ — в).

З рис. 3в видно, що, внаслідок скінченої величини потенціяльного бар'єра квазічастинки проникають з ядра в навколишнє середовище. При цьому у всіх станах імовірність перебування квазічастинки в середовищі швидко спадає з її віддаленням від межі розділу середовищ. При всіх значеннях n зі збільшенням величини l максимуми ρ зміщується 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$_2$O)

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

Особливості електронного спектра в гетеросистемі (CdS/HgS/H$_2$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 енерґія електрона (E_{nl}) зростає. При заданій величині радіуса внутрішнього кристала (CdS) зі збільшенням кількости моношарів кристала (HgS) всі електронні енерґетичні рівні зміщуються до дна глибокої ями. Рівні, що знаходяться в ділянці енерґій 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 потенціяльних ямах, то кожна з них створює свою систему рівнів. При цьому менш глибока яма CdS фіксованого радіуса ($r_0 = 4a_{\mathrm{CdS}}$) за відсутности глибокої ями HgS створювала би спектр, показаний на рис. 4 б) ($l = 0$) штриховими лініями. Глибока яма HgS за відсутности мілкої CdS створювала би спектр, залежніть якого від числа моношарів HgS показана на цьому ж рисунку 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 енерґій, 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 енерґій 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 потенціяльного бар'єра, квазічастинки проникають з ядра в навколишнє середовище. При цьому у всіх станах імовірність перебування в середовищі швидко спадає з віддаленням від межі розділу середовищ. При всіх значеннях n зі збільшенням величини орбітального квантового числа l максимуми густини ймовірности зміщуються все далі від центра системи, оскільки збільшення l еквівалентне збільшенню орбітального 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 ймовірности 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_2O), а дірка з малою ймовірністю може знаходитися в ядрі (CdS) і не може потрапити в середовище (H_2O) через безмежний потенціяльний бар'єр.

У тих станах з $n > 1$, де енерґетичні рівні електрона й дірки більші, ніж величина потенціяльного 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.

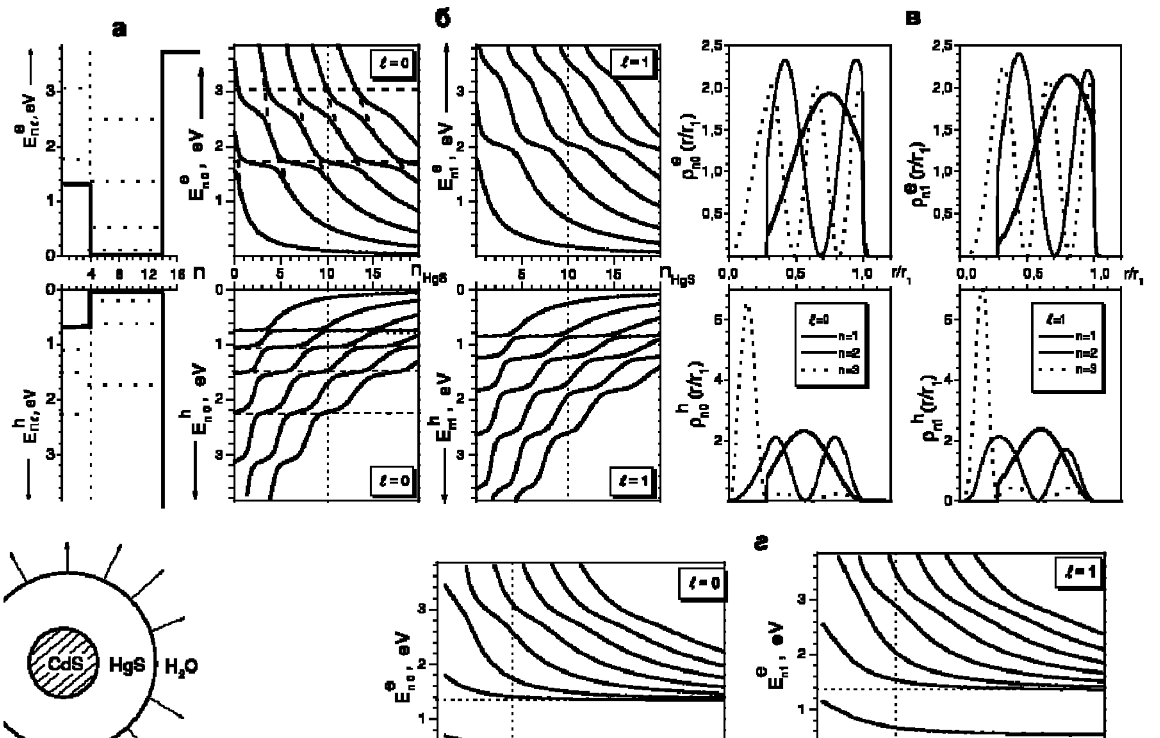

Рис. 4. Геометрична та енерґетична схеми сферичної наноструктури CdS/HgS/H_2O — а); залежність електронного та діркового спектрів від n_{HgS} — б); густини ймовірности перебування електрона та дірки в станах з $n = 1,\ 2,\ 3$ та $l = 0,\ 1$ — в).

На рис. 4г показано поведінку електронного спектра в системі ($HgS/CdS/H_2O$) при фіксованому радіусі ($r_0 = 15a_{\mathrm{HgS}}$) внутрішнього кристала (HgS) залежно від кількости 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 енерґій між дном мілкої і глибокої ям енерґетичні рівні, сформовані глибшою ямою HgS, практично не залежать від товщини мілкої ями CdS.

C. Спектри електрона, дірки й екситона у складній наносистемі $CdS/HgS/CdS/H_2O$

Особливості поведінки спектрів електрона й дірки залежно від товщин різних шарів сферичної наносистеми 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 енерґії збудження (E_{1s}) електрона й дірки у $1s$ стани. На рис. 5а,б,в наведена залежність E_{1s} від товщини кожного з трьох шарів при фіксованих розмірах двох інших шарів сферичної наносистеми $CdS/HgS/CdS/H_2O$. З рис. 5а видно, що при фіксованих розмірах ядра $n_{\mathrm{CdS}} = 3,\ 4$ і зовнішнього шару ($n_{\mathrm{CdS}} = 0 \div 2$) залежність E_{1s} від товщини шару–ями HgS є значною при зміні товщини на кілька моношарів. З рисунка 5б,в видно, що за наявности 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 Δ величина E_{1s} практично не змінюється.

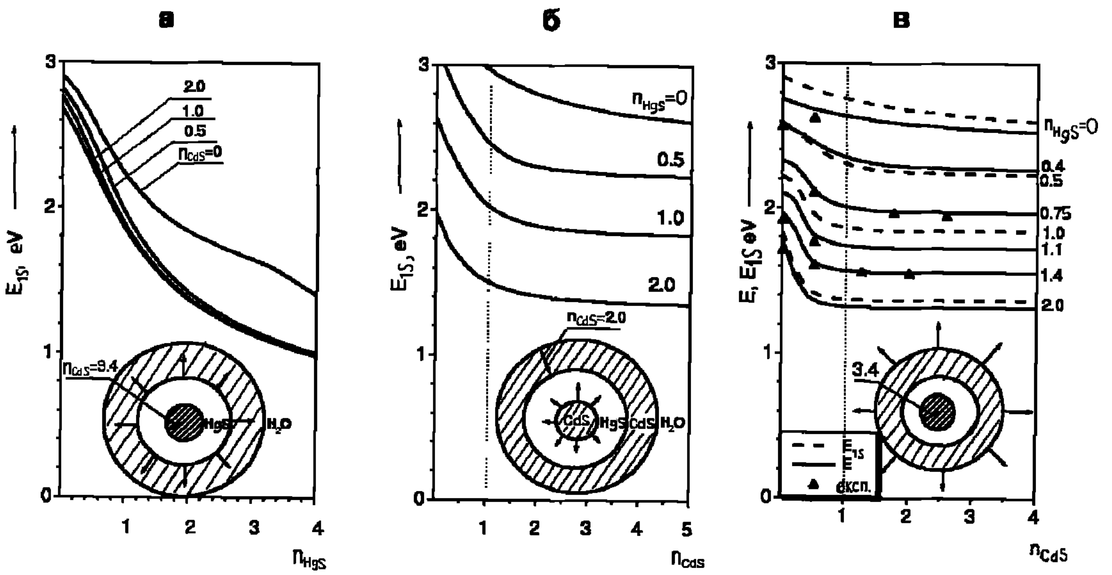

Рис. 5. Залежність енерґії E_{1s} від товщини шару HgS — а) та шарів CdS — б), залежність енерґії збудження екситона E (суцільні лінії), енерґії E_{1s} (штрихові лінії) та експериментальні значення E з праці [5] (трикутники) — в).

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 $CdS/HgS/CdS/H_2O$ [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 β–модифікації складається із гранецентрованих 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 Δ (яка в ідеалі також має бути кратною півнаношару), то легко розрахувати, що при цьому приріст радіуса (ρ) апроксимувальної сфери буде

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

Результат розрахунку енерґії збудження екситона ($E = E_{1s} - E_{зв}$) в наносистемі $CdS/HgS/CdS/H_2O$, виконаний на основі моделі апроксимувальних сфер згідно з теорією розділу II, наведено на рис. 5в. Як видно з рис. 5в, експериментальні значення енерґії (з праці [5]) мають добре виражену тенденцію розташування в околі теоретичних залежностей E від Δ_{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 "квазітетараедральну" 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 $CdS/HgS/CdS/H_2O$ spherical nanoheterosystem is calculated. The obtained results are compared with the experimental data.