

## СПЕКТР КВАНТОВО-РАЗМЕРНОЙ ЭЛЕКТРОННО-ДЫРОЧНОЙ ПАРЫ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОКРИСТАЛЛАХ

© С.И.Покутный

Криворожский государственный педагогический институт,  
324086 Кривой Рог, Украина

(Получена 20 января 1995 г. Принята к печати 25 января 1996 г.)

Проводится сравнение теоретической зависимости спектра уровней электронно-дырочной пары от размера полупроводникового нанокристалла с экспериментальными спектрами оптического поглощения нанокристаллов. Такое сравнение дает возможность определить минимальные размеры нанокристаллов CdS, которые ответственны за дополнительное поглощение в длинноволновой части спектра.

1. В рамках адиабатического приближения ( $m_e \ll m_h$ , где  $m_e$  и  $m_h$  — эффективные массы электрона и дырки в нанокристалле), используя только 1-й порядок теории возмущений на функциях сферической потенциальной ямы бесконечной глубины, в работах [1,2] был получен спектр электронно-дырочной пары (ЭДП)

$$E_{n_e,0}^{t_h}(\bar{S}) = E_g + (\pi^2 n_e^2 / \bar{S}^2) K \beta +$$

$$+ \bar{S}^{-1} [Z_{n_e,0} + P_{n_e,0} + (\varepsilon_2 / \varepsilon_1)] + \omega(\bar{S}) [t_h + (3/2)] \quad (1)$$

в состоянии ( $n_e, l_e = 0, t_h$ ) в сферическом полупроводниковом нанокристалле (ПН) с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_2$ , погруженном в диэлектрическую матрицу с  $\varepsilon_1$ , причем  $\varepsilon_2 \gg \varepsilon_1$ . Здесь  $n_e, t_h$  — главные квантовые числа электрона и дырки,  $l_e$  — орбитальное квантовое число электрона,  $\bar{S} = \bar{a}/a_h$  — безразмерный радиус ПН,  $a_h$  и  $E_g$  — боровский радиус дырки и ширина запрещенной зоны в неограниченном полупроводнике с проницаемостью  $\varepsilon_2$  соответственно. Энергия в (1) измеряется в единицах  $Ry = \hbar^2 / 2m_h a_h^2$ , коэффициент  $K = 0.67$  учитывает разброс нанокристаллов по радиусам  $\bar{a}$  [3], а параметр  $\beta = m_e / m_h$ . Кроме того, проведенная в работе [4] численная обработка результатов рентгеновских измерений с учетом разброса ПН по размерам показала, что среднее по распределению Лифшица-Слезова [5] значение

радиуса ПН  $\bar{a} = 0.85a$  [4], где  $a$  — значение радиуса ПН, полученное в монодисперсном (без учета разброса в размерах) приближении.

Спектр ЭДП (1) получен для нанокристаллов, размеры которых  $a$  ограничены условием

$$a_0 \ll a_h \ll \bar{a} \lesssim a_e, \quad (2)$$

где  $a_e$  — боровский радиус электрона в полупроводнике с проницаемостью  $\epsilon_2$ , а  $a_0$  — характерный размер порядка межатомного. При выполнении этого условия в потенциальной энергии ЭДП поляризационное взаимодействие электрона и дырки с поверхностью ПН играет существенную роль. Условие (2) позволяет также рассматривать движение электрона и дырки в ПН в приближении эффективной массы.

В спектре ЭДП (1) последний член представляет собой спектр дырки, которая совершает осцилляторные колебания с частотой [6]

$$\omega(\bar{S}, n_e) = 2.232 [1 + (2/3)\pi^2 n_e^2]^{1/2} \bar{S}^{-3/2} \quad (3)$$

в адиабатическом электронном потенциале в ПН. Основной вклад в спектр ЭДП (1), полученный в рамках адиабатического приближения, вносит второй член (кинетическая энергия электрона), который обусловлен чисто пространственным ограничением области квантования, и только в качестве поправок выступают два последних члена, которые связаны с кулоновским и поляризационным взаимодействием электрона и дырки с поверхностью ПН. При этом параметры  $Z_{n_e,0}$  и  $P_{n_e,0}$  были определены в [1,2]:

$$Z_{n_e,0} = 2 \int_0^1 dx \sin^2(\pi n_e x) / (1 - x^2),$$

$$P_{n_e,0} = 2\text{Ci}(2\pi n_e) - 2\ln(2\pi n_e) - 2\gamma + (\epsilon_2/\epsilon_1) - 1, \quad (4)$$

где  $\text{Ci}(y)$  — интегральный косинус,  $\gamma = 0.577$  — постоянная Эйлера.

Таким образом, поляризационное взаимодействие электрона и дырки с поверхностью ПН, так же как и размерное квантование носителей заряда дают вклад в перенормировку энергетической щели ПН (1).

В настоящем сообщении путем сравнения теоретического спектра ЭДП (1) в ПН с экспериментальными спектрами поглощения [7] получены минимальные размеры  $\bar{a}$  нанокристаллов CdS, которые были ответственны за дополнительное поглощение в длинноволновой части спектра.

2. Обратимся к результатам эксперимента [7]. В этой работе исследовались низкотемпературные ( $T \leq 80$  К) спектры поглощения нанокристаллов сульфида кадмия ( $\epsilon_2 = 9.3$ ), диспергированных в прозрачной диэлектрической матрице  $\text{SiO}_2$  ( $\epsilon_1 \simeq 1.8$ ). Серии образцов с концентрацией полупроводниковой фазы  $\simeq 23\%$  были получены при разных режимах отжига. Кроме того, в [7] был исследован спектр исходного нетермообработанного образца (спектр 4). Наблюдаемый край поглощения в нетермообработанной пленке авторы [7] связывали с поглощением света ПН CdS. В результате термообработки образцов в их спектрах наблюдалось дополнительное поглощение в длинноволновой

части спектра, второй которого сдвигался в коротковолновую сторону при уменьшении температуры отжига (спектры 1-3). Авторы работы [7] предполагали, что этот сдвиг обусловлен квантово-размерным эффектом и связан с уменьшением среднего размера ПН CdS при понижении температуры термообработки.

Эффективные массы электрона и дырки в CdS составляют  $m_e = 0.205m_0$  и  $m_h = 5m_0$  (т.е.  $m_e \ll m_h$ ). Спектр ЭДП  $E_{1,0}^0(\bar{S})$  (1) применим к условиям эксперимента [7] в области радиусов ПН  $\bar{a} \leq a_e \simeq 30 \text{ \AA}$ . Предположим, что спектры поглощения нанокристаллов CdS, полученные в [7], были обусловлены разрешенными переходами между основным состоянием ( $n_e = 0, l_e = 0, t_h = 0$ ) и первым возбужденным состоянием ( $n_e = 1, l_e = 0, t_h = 0$ ) ЭДП в нанокристалле [8]. Из условия эксперимента [7] следует, что наибольшим размером  $\bar{a}$  из всех нанокристаллов CdS, имеющих минимальные радиусы  $\bar{a}$  (они же являются ответственными за длинноволновый край поглощения в спектрах), обладают ПН, формирующие спектр поглощения образца (спектр 1). Сравнивая теоретический спектр ЭДП  $E_{1,0}^0(\bar{S})$  (1) (с учетом (3) и (4)) со значением энергии края поглощения  $E_1 = 3.27 \text{ эВ}$  в спектре 1, получим минимальный размер ПН  $\bar{a}_1 = 29.7 \text{ \AA}$ . Отметим, что найденное значение радиуса нанокристалла CdS  $\bar{a}_1$  удовлетворяет условиям существования (2) для спектра ЭДП (1).

Из условия эксперимента [7] вытекает, что минимальные размеры нанокристаллов CdS, поглощение света которыми привело к формированию спектров 2, 3, были меньше радиуса  $\bar{a}_1$ . Такие значения радиусов ПН  $\bar{a}$  не могут, по-видимому, удовлетворять условию (2) для существования спектра ЭДП (1). В этой связи, чтобы получить минимальные размеры ПН  $\bar{a}$  (для спектров 2, 3), необходимо провести сравнение спектра ЭДП  $E_{1,0}^0(\bar{S})$  (полученного нами ранее вариационным методом для нанокристаллов CdS в работе [9]) со значениями энергии края поглощения  $E_2 = E_3 = 3.77 \text{ эВ}$  (спектры 2 и 3). В результате найдем следующие значения для минимальных радиусов нанокристаллов CdS:  $\bar{a}_2 = \bar{a}_3 = 14.5 \text{ \AA}$ .

Таким образом, сравнение теоретической зависимости энергетического спектра ЭДП от величины радиуса нанокристаллов с экспериментальным спектром поглощения ПН дает возможность получить значения радиусов  $\bar{a}$  этих нанокристаллов. Такое сравнение представляет собой новый метод определения размеров полупроводниковой компоненты в квазиульмерных структурах.

Работа выполнена при частичной поддержке Международного научного фонда Дж. Сороса.

#### Список литературы

- [1] С.И. Покутний. ФТТ, **34**, 2386 (1992).
- [2] S.I. Pokutnyi. Phys. Lett. A, **168**, 433 (1992).
- [3] Ал.Л. Эфрос, А.Л. Эфрос. ФТП, **16**, 1209 (1982).
- [4] А.И. Екимов, А.А. Онущенко, М.Э. Райх, Ал.Л. Эфрос. ЖЭТФ, **90**, 1795 (1986).
- [5] И.М. Лифшиц, В.В. Слезов. ЖЭТФ, **35**, 479 (1958).
- [6] С.И. Покутний. ФТП, **25**, 628 (1991).

- [7] С.Ф. Гуревич, А.И. Екимов, И.А. Кудрявцев. ФТП, **26**, 102 (1992).  
[8] С.И. Покутний. Автореф. докт. дис. (Одесса, 1994).  
[9] Н.А. Ефремов, С.И. Покутний. ФТТ, **27**, 48 (1985).

Редактор Т.А. Полянская

## **Spectrum of levels of an electron-hole pair in semiconductor nanocrystals**

*S.I. Pokutnyi*

Krivoy Rog State Pedagogical Institute, 324086 Krivoy Rog, the Ukraine

---