

Влияние промежуточного слоя с переменной от координаты диэлектрической проницаемостью на энергию основного состояния электрона в сферической сложной наногетеросистеме

© В.И. Бойчук, Р.Ю. Кубай

Дрогобычский государственный педагогический университет им. И. Франко,
82100 Дрогобыч, Львовская обл., Украина

E-mail: fizmat@drohobych.net

(Поступила в Редакцию 10 января 2000 г.
В окончательной редакции 18 мая 2000 г.)

Исследовано влияние границ раздела многослойного сферического микрокристалла на заряженную частицу. Рассматривается случай, когда возле границ раздела существует промежуточный слой, в котором диэлектрическая проницаемость является функцией координаты. Методом классических функций Грина установлена функциональная зависимость от расстояния потенциальной энергии заряда. На примере сферической структуры HgS/CdS рассчитана энергия основного и возбужденного состояний электрона как в случае наличия промежуточного слоя с переменной от координаты диэлектрической проницаемостью, так и в случае его отсутствия.

Успехи физики квантовых квазиуменьшенных наноструктур связаны не только с постоянно возрастающими возможностями технологии получения совершенных и сложных гетеросистем, но и с усовершенствованием их теоретических моделей.

Первые теоретические работы [1–8], в которых проведен анализ экспериментальных измерений экситонных спектров поглощения нанокристаллов CuCl, CdS, диспергированных в стеклянных матрицах [9–11], основывались на простой модели сферической, бесконечно глубокой потенциальной ямы для электронов и дырок. На основании такой модели получены основные теоретические результаты, которые качественно согласуются с экспериментом. В частности, показано, что коротковолновый сдвиг максимума коэффициента поглощения обратно пропорционален величине $m_e a^2$ (m_e — масса электрона, a — радиус квантовой точки), если $a_h \ll a \ll a_e$, $a \ll a_h, a_e$ (a_h, a_e — боровские радиусы электрона и дырки), и величине $(m_e + m_h)a^2$, когда радиус нанокристалла удовлетворяет условию $a \gg a_h, a_e$.

В работах [12–17] для гетеросистем разной природы учтено наличие на границе раздела связанных поверхностных зарядов с помощью потенциала сил электростатических изображений. Исследованы условия возникновения связанных состояний электрона возле границ раздела. Определено влияние поверхностных поляризационных зарядов гетероструктуры на энергию экситона и силу осциллятора перехода в экситонное состояние. Расчеты показывают, что в случае близости диэлектрических проницаемостей сред гетеросистемы за основу можно взять модель прямоугольного бесконечного потенциала, а влияние поверхностных зарядов учесть с помощью теории возмущений.

Дальнейшие экспериментальные измерения доказали возможность получения таких гетероструктур, когда в качестве нанокристалла и матрицы выступают различные полупроводниковые соединения [18–21].

В последние годы особенно интенсивно начали исследоваться многослойные наносистемы, в которых квантовая точка содержит ядро и несколько полупроводниковых слоев [20]. Интересные результаты получены для гетеросистем с близко расположенными квантовыми ямами [20–25].

Теоретические работы, в которых исследуются упомянутые выше гетеросистемы, основываются на моделях квантовых точек, в которых электрон и дырка расположены в конечных потенциальных ямах. Такой подход дает возможность объяснить генезис энергетического спектра при наличии двух частиц, туннелирование между слоями сложных наногетеросистем, расщепление энергетических уровней для близко расположенных квантовых точек [20,24,25].

Современная технология образования сложных наногетероструктур полупроводников и диэлектриков дает возможность получать их с достаточно высоким качеством. Однако в реальных условиях очень трудно создать неоднородную систему со скачкообразным изменением всех физических параметров на границе раздела [26,27]. К таким параметрам можно отнести работу выхода, эффективные массы электронов (дырок), диэлектрические проницаемости сред и т.д.

Очевидно, для гетероструктуры всегда существует промежуточный слой, в котором тот или иной физический параметр меняется от его значения для одного полупроводника (диэлектрика) до соответствующего значения для другого кристалла [27].

В данной работе учтено наличие промежуточного слоя возле границ раздела гетеросистемы для диэлектрической проницаемости сред. Предложена модель такого слоя и в рамках этой модели получено выражение для потенциальной энергии заряда в многослойной сферической гетероструктуре с промежуточными областями возле границ раздела. Для сферической структуры HgS/CdS рассчитана энергия основного и возбужденного состо-

ний электрона как в случае наличия промежуточного слоя с переменной от координаты диэлектрической проницаемостью, так и в случае его отсутствия.

1. Постановка задачи. Общие формулы

Рассматривается многослойная полупроводниковая наногетеросистема (рис. 1), образованная кристаллами с диэлектрическими проницаемостями $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n$. Границы раздела гетеросистемы являются концентрическими сферами с радиусами R_1, R_2, \dots, R_{n-1} . Диэлектрическая проницаемость возле границ раздела сред в областях толщиной L_1, L_2, \dots, L_{n-1} зависит от координаты r (r — расстояние от центра до данной точки пространства) и определяется формулой

$$\varepsilon(r) = \frac{1}{2} \{1 - S(r)\} \sum_{i=1}^n \varepsilon_i,$$

где

$$S(r) = \gamma_1 f\left(\frac{r-R_1}{L_1}\right) + \sum_{i=1}^{n-2} \gamma_{i+1} f\left(\frac{r-R_i}{L_i}\right) \times f\left(\frac{r-R_{i+1}}{L_{i+1}}\right) - \gamma_n f\left(\frac{r-R_{n-1}}{L_{n-1}}\right),$$

$$\gamma_j = \frac{\varepsilon_j}{\sum_{i=1}^n \varepsilon_i} \quad (j = 1, 2, \dots, n);$$

$f\left(\frac{r-R_i}{L_i}\right)$ — монотонная функция такая, что

$$f\left(|x| \geq \frac{1}{2}\right) = \pm 1, \quad f'\left(|x| \geq \frac{1}{2}\right) = 0$$

для любого значения i ($i = 1, 2, \dots, n-1$).

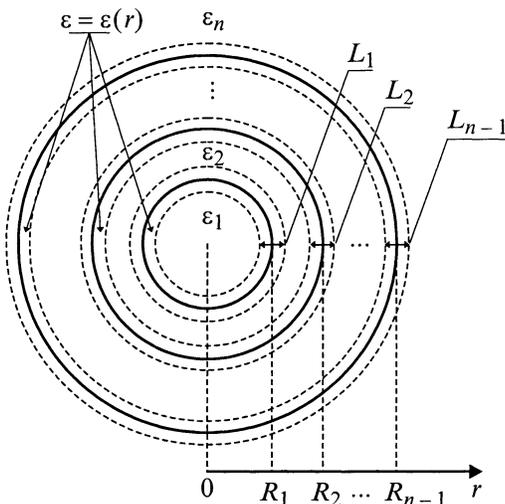


Рис. 1. Модель многослойной сферической наногетеросистемы.

Точечный заряд q , находящийся в \mathbf{r}_0 , образует в точке \mathbf{r} пространства потенциал $\phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$, который является решением уравнения Пуассона

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) + \frac{d}{dr} [\ln \varepsilon(r)] \frac{\partial}{\partial r} [\phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)] = -\frac{4\pi q}{\varepsilon(r)} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0),$$

где $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ — дельта-функция Дирака. Тогда потенциальная энергия заряда в поле индуцированной им же поляризации определяется формулой

$$U(\mathbf{r}) = \frac{q\phi(\mathbf{r})}{2}, \quad (1)$$

где

$$\phi(\mathbf{r}) = \lim_{\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}_0} \left\{ \phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) - \frac{q}{\varepsilon(r)} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} \right\}. \quad (2)$$

Уравнение Пуассона подстановкой

$$\phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = -4\pi q [\varepsilon(r)\varepsilon(r_0)]^{-1/2} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \quad (3)$$

упрощается

$$\nabla^2 G - V(r)G = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0), \quad (4)$$

где

$$V(r) = \frac{1}{2r^2} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon(r)}} \frac{d}{dr} \left[\frac{r^2}{\sqrt{\varepsilon(r)}} \frac{d}{dr} [\varepsilon(r)] \right],$$

а $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ — функция Грина.

Решение уравнения (4) проведено методом последовательных приближений. Такой подход предусматривает рассмотрение случая небольшого значения "потенциала" $V(r)$. Данное ограничение справедливо при условии

$$\left| \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_{i+1}}{\varepsilon_i + \varepsilon_{i+1}} \right| \ll 1,$$

что в большинстве экспериментальных случаев выполняется [18–20], так как в гетеросистемы входят полупроводники с близкими свойствами. Тогда функцию Грина можно представить в виде быстро сходящегося ряда

$$G = G^{(0)} + G^{(1)} + G^{(2)} + \dots \equiv G^{(0)} + \Delta G. \quad (5)$$

В нулевом приближении уравнение (4) имеет вид

$$\nabla^2 G^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0).$$

С точностью до постоянного множителя $G^{(0)}$ является потенциалом точечного заряда, поэтому

$$G^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = -\frac{1}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}. \quad (6)$$

Если учесть последовательно поправки высшего порядка малости, то для $G^{(n)}$ можно получить уравнение

$$\nabla^2 G^{(n)} - V(r)G^{(n-1)} = 0, \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

где

$$\begin{aligned} G^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) &= \int d\mathbf{r}_1 G^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) V(r_1) G^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_0), \\ G^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) &= \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 G^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) V(r_1) G^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ &\quad \times V(r_2) G^{(0)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_0), \\ G^{(n)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) &= \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_n G^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) \\ &\quad \times V(r_1) \dots V(r_n) G^{(0)}(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_0). \end{aligned} \quad (7)$$

Учитывая (2), (3), (5), (6), имеем, что $\phi(r)$ в уравнении (1) определяется поправками высшего порядка

$$\phi(r) = -\frac{4\pi q}{\varepsilon(r)} \Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}), \quad (8)$$

где

$$\Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = G^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) + G^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) + \dots$$

Если разложить функции в ряд Фурье

$$\begin{aligned} G^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) &\equiv G^{(0)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \\ &= -(2\pi)^{-3} \int d\mathbf{q} \frac{1}{q^2} \exp\{i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\}, \end{aligned}$$

$$V(r) = (2\pi)^{-3} \int d\mathbf{q} V(\mathbf{q}) \exp\{i\mathbf{q}\mathbf{r}\}$$

и подставить в (7), то можно получить

$$\begin{aligned} G^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) &= (2\pi)^{-6} \int d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 d\mathbf{r}_1 \frac{V(r_1)}{q_1^2 q_2^2} \\ &\quad \times \exp[i(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2)(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)]. \end{aligned}$$

После перехода к сферической системе координат и интегрирования по $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2$ формула для $G^{(1)}$ преобразуется к виду

$$G^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi r} \int_0^\infty dr_1 r_1 V(r_1) \ln \left| \frac{r_1 + r}{r_1 - r} \right|.$$

Поправка $G^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r})$ получается аналогично

$$\begin{aligned} G^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) &= -\frac{1}{8\pi r} \int_0^r dr_1 r_1 V(r_1) \int_0^{r_1} dr_2 r_2 V(r_2) Q\left(\frac{r_2}{r}\right) \\ &\quad - \frac{1}{8\pi r} \int_0^r dr_1 r_1 V(r_1) Q\left(\frac{r_1}{r}\right) \int_{r_1}^r dr_2 r_2 V(r_2) \\ &\quad - \frac{1}{8\pi r} \int_0^r dr_1 r_1 V(r_1) \int_r^\infty dr_2 r_2 V(r_2) Q\left(\frac{r_1}{r_2}\right) \\ &\quad - \frac{1}{8\pi r} \int_r^\infty dr_1 r_1 V(r_1) \int_0^r dr_2 r_2 V(r_2) Q\left(\frac{r_2}{r_1}\right) \\ &\quad - \frac{1}{8\pi r} \int_r^\infty dr_{r_1} r_1 V(r_1) Q\left(\frac{r}{r_1}\right) \int_r^{r_1} dr_2 r_2 V(r_2) \\ &\quad - \frac{1}{8\pi r} \int_r^\infty dr_1 r_1 V(r_1) \int_{r_1}^\infty dr_2 r_2 V(r_2) Q\left(\frac{r}{r_2}\right), \end{aligned}$$

где

$$Q(x) = \int_0^x dy \frac{1}{y} \ln \frac{1+y}{1-y}, \quad |x| \leq 1.$$

Данные результаты являются достаточно общими. Для их конкретизации необходимо учесть явный вид функции $V(r)$ и выразить ее через малые параметры γ_i . После разложения в ряд по степеням γ_i и учета только слагаемых, пропорциональных γ_i и γ_i^2 , $V(r)$ представляется формулой

$$V(r) \approx -\frac{1}{2r} \frac{d^2}{dr^2} [rS(r)] - \frac{1}{4r} \frac{d^2}{dr^2} [r[S(r)]^2] + \frac{1}{4} \left[\frac{d}{dr} [S(r)] \right]^2.$$

Тогда ΔG запишется в виде

$$\begin{aligned} \Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}) &= G^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) + G^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \\ &= -\frac{1}{8\pi} \int_0^\infty d[r_1 S(r_1)] \frac{1}{r_1^2 - r^2} \\ &\quad - \frac{1}{16\pi} \int_0^\infty d[r_1 [S(r_1)]^2] \frac{1}{r_1^2 - r^2} \\ &\quad - \frac{1}{32\pi r} \int_0^\infty d[r_1 [S(r_1)]^2] \ln \left| \frac{r_1 + r}{r_1 - r} \right| \frac{1}{r_1} \\ &\quad - \frac{1}{8\pi r} \int_0^r d[r_1 S(r_1)] \int_r^\infty d[r_2 S(r_2)] \frac{1}{r_1^2 - r_2^2}. \end{aligned} \quad (9)$$

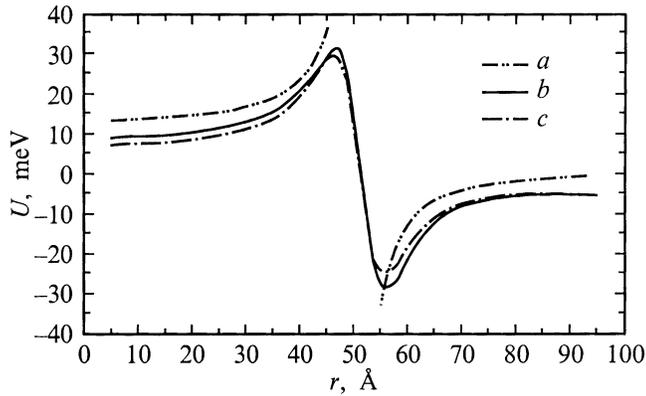


Рис. 2. Зависимость потенциальной энергии заряженной частицы от расстояния к центру нанокристалла. a — $U(r)$ при учете поляризационных зарядов на границе раздела, b — $U(r)$, c — $U_1(r)$.

Как видно из (1) и (8), общее выражение для потенциальной энергии заряда представляется через поправки к функции Грина (9)

$$U(r) = -\frac{2\pi q^2}{\varepsilon(r)} \Delta G.$$

Экспериментально [20] исследуются гетеросистемы, состоящие из двух, трех и даже четырех слоев. Для каждого случая нетрудно получить аналитическое выражение для $U(r)$, в частности для двухслойной системы (нанокристалл–матрица), когда

$$\begin{aligned} \varepsilon(r) &= \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} \left\{ 1 - \gamma_1 f\left(\frac{r-R_1}{L_1}\right) + \gamma_2 f\left(\frac{r-R_1}{L_1}\right) \right\} \\ &= \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} \left\{ 1 - (\gamma_1 - \gamma_2) f\left(\frac{r-R_1}{L_1}\right) \right\} \\ &= \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} \left\{ 1 - \gamma f\left(\frac{r-R}{L}\right) \right\}, \end{aligned}$$

$$\gamma = \gamma_1 - \gamma_2 = \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} - \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2},$$

потенциальная энергия заряда запишется в таком виде

$$\begin{aligned} U(r) &= \frac{q^2 \gamma}{4\varepsilon(r)} \int_0^\infty d \left[r_1 f\left(\frac{r_1-R}{L}\right) \right] \frac{1}{r_1^2 - r^2} + \frac{q^2 \gamma^2}{8\varepsilon(r)} \\ &\times \int_0^\infty d \left[r_1 \left[f\left(\frac{r_1-R}{L}\right) \right]^2 \right] \frac{1}{r_1^2 - r^2} + \frac{q^2 \gamma^2}{16\varepsilon(r)r} \\ &\times \int_0^\infty d \left[r_1 \left[f\left(\frac{r_1-R}{L}\right) \right]^2 \right] \ln \left| \frac{r_1+r}{r_1-r} \right| \frac{1}{r_1} + \frac{q^2 \gamma^2}{4\varepsilon(r)r} \\ &\times \int_0^r d \left[r_1 f\left(\frac{r_1-R}{L}\right) \right] \int_r^\infty d \left[r_2 f\left(\frac{r_2-R}{L}\right) \right] \frac{1}{r_1^2 - r_2^2}. \end{aligned}$$

Детальное определение $U(r)$ возможно после конкретизации функции $f = f\left(\frac{r-R}{L}\right)$. Для исследуемых гетероструктур она неизвестна. Анализ показывает, что конечные результаты качественно не зависят от конкретного вида $f = f\left(\frac{r-R}{L}\right)$, если она является плавной функцией. В данной работе считается, что

$$f\left(\frac{r-R}{L}\right) = \text{th}\left(\frac{r-R}{L}\right).$$

Потенциальную энергию удобно представить в виде

$$U(r) = U_1(r) + U_2(r), \quad (11)$$

где в $U_1(r)$ входят слагаемые, пропорциональные γ_i , а в $U_2(r)$ — γ_i^2

$$\begin{aligned} U_1(r) &= \frac{q^2 \gamma}{4\varepsilon(r)} \int_0^\infty dr_1 \frac{1}{r_1^2 - r^2} \\ &\times \left[\frac{r_1}{L} \text{sech}^2\left(\frac{r_1-R}{L}\right) + \text{th}\left(\frac{r_1-R}{L}\right) \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} U_2(r) &= \frac{q^2 \gamma^2}{8\varepsilon(r)} \int_0^\infty dr_1 \frac{1}{r_1^2 - r^2} \left[\frac{2r_1}{L} \text{sech}^2\left(\frac{r_1-R}{L}\right) \right. \\ &\times \text{th}\left(\frac{r_1-R}{L}\right) + \text{th}^2\left(\frac{r_1-R}{L}\right) \left. \right] + \frac{q^2 \gamma^2}{16\varepsilon(r)r} \\ &\times \int_0^\infty dr_1 \ln \left| \frac{r_1+r}{r_1-r} \right| \frac{1}{r_1} \left[\frac{2r_1}{L} \text{sech}^2\left(\frac{r_1-R}{L}\right) \right. \\ &\times \text{th}\left(\frac{r_1-R}{L}\right) + \text{th}^2\left(\frac{r_1-R}{L}\right) \left. \right] + \frac{q^2 \gamma^2}{4\varepsilon(r)r} \\ &\times \int_0^r dr_1 \left[\frac{r_1}{L} \text{sech}^2\left(\frac{r_1-R}{L}\right) + \text{th}\left(\frac{r_1-R}{L}\right) \right] \\ &\times \int_r^\infty dr_2 \frac{1}{r_1^2 - r_2^2} \left[\frac{r_2}{L} \text{sech}^2\left(\frac{r_2-R}{L}\right) + \text{th}\left(\frac{r_2-R}{L}\right) \right]. \end{aligned}$$

На рис. 2 представлены зависимости $U = U(r)$ (кривая b) и $U_1 = U_1(r)$ (кривая c) для нанокристалла HgS/CdS при $R = 50 \text{ \AA}$, $L = 5 \text{ \AA}$ (физические параметры приведены в табл. 1). Учет наличия поляризационных зарядов на границе раздела сред в случае скачкообразного изменения диэлектрической проницаемости ведет к тому, что потенциальная энергия заряженной

Таблица 1. Параметры материалов

Кристалл	$m_e(m_0)$	$V_e, \text{ meV}$	ε
HgS	0.036	-5000	11.36
CdS	0.2	-3800	5.5

частицы имеет кулоновский характер [12–17] и функция $U = U(r)$ содержит разрыв при $r = R$ (кривая a)

$$U(r) = \frac{q^2\gamma}{2\varepsilon(r)R} \left\{ \frac{R^2}{R^2 - r^2} + W \right\}, \quad (12)$$

где

$$\varepsilon(r) = \varepsilon_1\Theta(R - r) + \varepsilon_2\Theta(r - R),$$

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x < 0, \end{cases}$$

$$W = \begin{cases} \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} F\left(1, \gamma_2, \gamma_2 + 1, \left(\frac{r}{R}\right)^2\right), & r < R, \\ \left(\frac{R}{r}\right)^2 F\left(1, \gamma_2, \gamma_2 + 1, \left(\frac{R}{r}\right)^2\right), & R < r, \end{cases}$$

$F(x, y, z, u)$ — гипергеометрическая функция. Если же $\varepsilon = \varepsilon(r)$ имеет вид (10), то, как видно из рис. 2, функция $U = U(r)$ становится непрерывной (кривая b) и не-монотонно изменяется в области промежуточного слоя. Причем основной вклад в $U = U(r)$ вносит слагаемое $U_1 = U_1(r)$ (кривая c). Важно отметить, что уменьшение ширины промежуточного слоя (L) сопровождается более резкой зависимостью $U = U(r)$ и в случае $L \rightarrow 0$ стремится к известному результату для потенциала сил изображений (кривая b совпадает с кривой a).

2. Энергия S -состояний электрона в системе HgS/CdS

Рассматривается двухслойная сферическая наногетеросистема, состоящая из ядра HgS, помещенного в матрицу CdS.

Гамильтониан электрона имеет вид

$$H = T + V(r) \equiv H^0 + U(r),$$

где

$$V(r) = V_0(r) + U(r), \\ H^0 = T + V_0(r).$$

Основная часть гамильтониана (H^0) выбрана так, что уравнение Шредингера, которое описывает данную систему, при отбрасывании возмущения $U(r)$ решается точно

$$(E_n^0 - H^0)\Psi_n = 0.$$

В зависимости от выбора модели гетеросистемы потенциальная энергия $V_0(r)$ имеет вид "прямоугольного" сферического конечного (рис. 3) или бесконечного потенциала. Тогда в качестве возмущения $U(r)$ выступают потенциалы, которые соответственно имеют вид (11) или (12).

Для большинства реальных систем при использовании любой модели можно ограничиться поправками первого и второго порядков теории возмущений

$$E_n' = V_{nn}, \quad E_n'' = \sum_{n' \neq n} \frac{|V_{nn'}|^2}{E_n^0 - E_{n'}^0}, \quad (13)$$

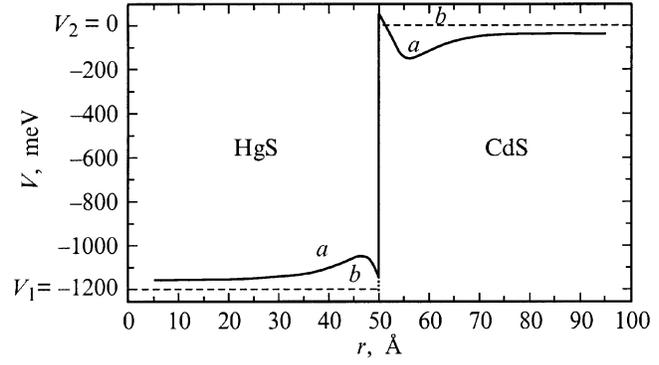


Рис. 3. Модель конечного потенциального барьера при наличии промежуточного слоя (кривая a) и при его отсутствии (кривая b).

где

$$V_{nn'} = \int R_{n0}U(r)R_{n'0}r^2dr.$$

Поэтому, для того чтобы отыскать E_n' и E_n'' , нужно определить волновые функции для основного гамильтониана.

Рассматривается сначала модель, для которой электрон в нулевом приближении характеризуется радиально-симметрическим потенциалом вида

$$V_0(r) = \begin{cases} V_1, & 0 < r < R, \\ V_2, & R < r < \infty. \end{cases}$$

Поскольку в каждой из сред он имеет разные эффективные массы

$$m = \begin{cases} m_1, & 0 < r < R, \\ m_2, & R < r < \infty, \end{cases}$$

то для определения энергетического спектра необходимо решить стационарное уравнение Шредингера

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m} \nabla + V_0(\mathbf{r}) \right\} \Psi(\mathbf{r}) = E_n^0 \Psi(\mathbf{r}).$$

С учетом сферической симметрии его решение можно подать в виде

$$\Psi_{nlm}(r, \Theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\Theta, \varphi).$$

Если рассматривать S -состояния частицы ($l = 0$) и область энергий $V_1 \leq E_n^0 \leq V_2$, тогда радиальная часть волновой функции запишется через сферические функции Бесселя

$$R_{n0}(r) = \begin{cases} A j_0(rk_n), & 0 < r < R, \\ B h_0^+(ir\chi_n), & R < r < \infty, \end{cases}$$

где

$$k_n^2 = \frac{2m_1}{\hbar^2}(E_n^0 - V_1), \quad \chi_n^2 = \frac{2m_2}{\hbar^2}(V_2 - E_n^0).$$

Для определения неизвестных коэффициентов используются условия непрерывности волновых функций и плотности потока вероятности на границе раздела и условие нормировки

$$\begin{aligned} A j_0(rk_n)|_{r=R} &= B h_0^+(ir\chi_n)|_{r=R}, \\ \frac{A}{m_1} \frac{d}{dr} [j_0(rk_n)]|_{r=R} &= \frac{B}{m_2} \frac{d}{dr} [h_0^+(ir\chi_n)]|_{r=R}, \\ \int_0^\infty |R_{n0}(r)|^2 r^2 dr &= 1. \end{aligned} \quad (14)$$

Поскольку

$$R_{n0}(r) = \begin{cases} A \frac{\sin(rk_n)}{rk_n}, \\ -B \frac{\exp(-r\chi_n)}{r\chi_n}, \end{cases} \quad (15)$$

то подстановкой выражений для волновых функций (15) и их производных в (14) при условии нетривиальности решения получается дисперсионное уравнение для определения энергий E_n^0 ($n = 0, 1, 2, \dots$) S -состояний

$$\begin{aligned} -\frac{m_1}{k_n} \sin(Rk_n) \exp(-R\chi_n) \left(1 + \frac{1}{R\chi_n}\right) \\ + \frac{m_2}{\chi_n} \exp(-R\chi_n) \left(\frac{\sin(Rk_n)}{Rk_n} - \cos(Rk_n)\right) = 0. \end{aligned}$$

Если для сравнения рассмотреть также модель бесконечного потенциального барьера на границе раздела, то уравнение дисперсии упрощается

$$\sin(Rk_n) = 0.$$

Первая и вторая поправки к энергии n -состояния запишутся в виде формул (13).

3. Анализ результатов

На основании формул предыдущих параграфов с помощью ЭВМ проведены расчеты (табл. 2) энергий S -состояний (E_n^0 и $\Delta E_n = E_n' + E_n''$) в наногетеросистеме HgS/CdS.

Для модели бесконечной "прямоугольной" потенциальной ямы энергетические уровни основного и возбужденного состояний существуют при произвольных значениях радиусов нанокристалла. Увеличение R сопровождается понижением уровней энергии, а учет сил электростатических изображений ведет к их повышению.

Для модели конечной потенциальной ямы дискретный энергетический уровень возникает в системе при $R \geq 7 \text{ \AA}$. Увеличение радиуса нанокристалла ведет также к понижению уровня. Когда же его радиус становится больше 42 \AA , в квантовой яме возникает второй дискретный уровень. Что касается поправки ΔE к энергии,

Таблица 2. Зависимость основного и возбужденного состояний энергии (E_0^0, E_1^0), поправок к энергии ($\Delta E_0, \Delta E_1$) от радиуса (R) для конечной потенциальной ямы при ширине промежуточного слоя $L = 5 \text{ \AA}$ и для бесконечного потенциала на границе раздела

$R, \text{ \AA}$	Вид потенциальной ямы							
	конечная				бесконечная			
	$E_0^0, \text{ meV}$	$E_1^0, \text{ meV}$	$\Delta E_0, \text{ meV}$	$\Delta E_1, \text{ meV}$	$E_0^0, \text{ meV}$	$E_1^0, \text{ meV}$	$\Delta E_0, \text{ meV}$	$\Delta E_1, \text{ meV}$
20	-636	-	30.78	-	1411	9246	42.03	46.56
25	-757	-	28.18	-	471	5485	33.62	37.24
30	-841	-	25.62	-	-40	3442	27.96	30.95
35	-902	-	23.31	-	-348	2211	23.89	26.48
40	-948	-	21.11	-	-548	1411	20.76	23.26
45	-984	-73	19.27	10.53	-685	863	18.33	20.67
50	-1012	-244	17.92	13.19	-783	471	16.34	18.59

Таблица 3. Зависимость энергии возмущения (ΔE) от ширины промежуточного слоя (L) при $R = 50 \text{ \AA}$

$L, \text{ \AA}$	1	2	3	4
$\Delta E_0, \text{ meV}$	16.42	17.71	17.85	17.89
$\Delta E_1, \text{ meV}$	8.92	11.24	12.42	12.91

обусловленной наличием переходного слоя с переменной диэлектрической проницаемостью, то увеличение радиуса R сопровождается ее уменьшением. Физически результат понятен: рост R приводит к уменьшению влияния поверхности на энергетические уровни системы.

Проведенные расчеты показывают, что величина поправки зависит от энергетического состояния. Для состояния с большей энергией (табл. 3) поправка уменьшается. Кроме того, ΔE зависит от величины промежуточного слоя: уменьшение L сопровождается уменьшением ΔE . Причем зависимость $\Delta E = \Delta E(L)$ сильнее для состояний с большими энергиями.

Таким образом, в работе получено выражение для потенциальной энергии заряда в многослойной сферической гетеросистеме с промежуточными областями возле границ раздела, в которых диэлектрическая проницаемость среды является плавной функцией расстояния. Показано, что в отличие от классического потенциала сил изображений потенциальная энергия является непрерывной функцией. Рассмотрены различные модели сферической наноструктуры HgS/CdS. В рамках этих моделей рассчитаны энергии основного и возбужденного состояний электрона как в случае наличия промежуточного слоя, так и в случае его отсутствия. Проведен анализ полученных результатов.

Список литературы

- [1] Ал.Л. Эфрос, А.Л. Эфрос. ФТП **16**, 7, 1209 (1982).
- [2] Y. Kayanuma. Solid State. Commun. **59**, 6, 405 (1986).
- [3] Y. Kayanuma. Phys. Rev. **B38**, 14, 9797 (1988).

- [4] S.V. Nair, S. Sinha, K.C. Rustagi. *Phys. Rev.* **B35**, 8, 4098 (1987).
- [5] H.M. Schmidt, H. Weller. *Chem. Phys. Lett.* **129**, 6, 615 (1986).
- [6] Г.Б. Григорян, Э.М. Казарян, Ал.Л. Эфрос, Т.В. Язева. *ФТГ* **32**, 6, 1772 (1990).
- [7] В.А. Головацкий, Н.В. Ткач. Препринт ИТФ АН УССР, Киев (1990). С. 16.
- [8] Xia Jian-Vai. *Phys. Rev.* **B40**, 12, 8500 (1989-II).
- [9] А.И. Екимов, А.А. Онущенко. *Письма в ЖЭТФ* **34**, 6, 363 (1981).
- [10] А.И. Екимов, А.А. Онущенко. *ФТП* **16**, 7, 1215 (1982).
- [11] А.И. Екимов, А.А. Онущенко. *Письма в ЖЭТФ* **40**, 8, 337 (1984).
- [12] Н.А. Ефремов, С.И. Покутний. *ФТТ* **27**, 1, 48 (1985).
- [13] Н.А. Ефремов, С.И. Покутний. *ФТТ* **32**, 10, 2921 (1990).
- [14] Н.А. Ефремов, С.И. Покутний. *ФТТ* **32**, 6, 1637 (1990).
- [15] V.I. Voichuk, I.V. Bilynskii. *Phys. Stat. Sol.* **174**, 1, 463 (1992).
- [16] В.И. Бойчук, В.М. Ницович, Н.В. Ткач. *ФТТ* **22**, 3, 669 (1980).
- [17] В.И. Бойчук, О.Н. Войцехивская, В.А. Головацкий, Н.В. Ткач. *ФТТ* **37**, 3, 861 (1995).
- [18] J.C. Marini, B. Stebe, E. Kartheuser. *Phys. Rev.* **B50**, 19, 14302 (1994).
- [19] M.C. Klein, F. Nache, D. Ricord, C. Flytzanis. *Phys. Rev.* **B42**, 17, 11123 (1990).
- [20] D. Schooss, A. Mews, A. Eychmiiler, H. Weller. *Phys. Rev.* **B49**, 24, 17072 (1994-II).
- [21] R. Romestain, G. Fishman. *Phys. Rev.* **B49**, 3, 1774 (1994-I).
- [22] Н.Е. Капуткина, Ю.Е. Лозовик. *ФТТ* **40**, 12, 2226 (1998).
- [23] Н.Е. Капуткина, Ю.Е. Лозовик. *ФТТ* **40**, 11, 2127 (1998).
- [24] В.В. Криволапчук, Д.А. Мазуренко, Е.С. Москаленко, Н.К. Полетаев, А.Л. Жидиков, Т.С. Ченг, С.Т. Фоксон. *ФТТ* **40**, 5, 803 (1998).
- [25] Л.Е. Воробьев, И.Е. Титков, А.А. Торопов, В.Н. Тулупенко, Д.А. Фирсов, В.А. Шалычин, Т.В. Шубина, Е. Тowe. *ФТП* **32**, 7, 852 (1998).
- [26] Ж.И. Алфёров. *ФТП* **32**, 1, 3 (1998).
- [27] T. Nakamura. *J. Phys. Soc. Japan* **52**, 3, 973 (1983).