

03,09,12

Оптические переходы и фотолюминесценция в цилиндрической ядро/слой/оболочка гетероструктуре β -CdS/ β -HgS/ β -CdS

© В.А. Арутюнян, Д.Б. Айрапетян[†], Э.М. Казарян

Российско-Армянский университет,
Ереван, Армения

[†] E-mail: david.hayrapetyan@rau.am

Поступила в Редакцию 17 декабря 2019 г.

В окончательной редакции 17 декабря 2019 г.

Принята к публикации 30 марта 2020 г.

В приближении эффективной массы в рамках простой двухзонной модели теоретически рассмотрены состояния носителей заряда в квантуемом слое HgS цилиндрической ядро/слой/оболочка-гетероструктуры β -CdS/ β -HgS/ β -CdS. Рассмотрение проведено для различных интервалов геометрических размеров образца, при реализации в слое соответствующих режимов размерного квантования для носителей заряда. Для каждого случая учтено электростатическое взаимодействие между электроном и дыркой со своей спецификой, и в зависимости от размеров образца, получены соответствующие значения энергии основного состояния пары. В каждом случае рассмотрены также межзонные оптические переходы в образце и фотолюминесценция. Показано, что в каждом отдельном случае учет электростатического взаимодействия приводит к смещению пороговой частоты межзонного поглощения и люминесценции в коротковолновую область, а само значение частоты определяется геометрическими размерами образца.

Ключевые слова: ядро/слой/оболочка, экситон, межзонное поглощение, люминесценция.

DOI: 10.21883/FTT.2020.08.49596.656

1. Введение

Наряду со многими низкоразмерными полупроводниками в последние два десятилетия интенсивно исследуются также и многочисленные слоистые композиционные нанорадиальные структуры типа ядро/слой, ядро/слой/оболочка или же слоистые структуры квантовая точка–квантовая яма (см., например обзоры [1–9] и ссылки в них). Среди этих наногетероструктур определенный интерес представляют квазиодномерные структуры ядро/слой/оболочка с аксиальной симметрией [9–20]. Этот интерес обусловлен в первую очередь тем обстоятельством, что эти гетерофазные структуры комбинируют в себе свойства как квантовых пленок, так и квантовых нитей и квантовых точек и являются более многофункциональными, чем отдельные квантовые пленки, квантовые нити и квантовые точки. Кроме геометрических размеров, контролирующих квантовый размерный эффект носителей в образце, важной особенностью названных структур является также композиционная зависимость их свойств [21].

Благодаря указанным свойствам и возможностям названные структуры уже сейчас имеют реальное широкое применение в различных приборах твердотельной электроники [1–4,6,8,21–24] и современной биомедицины [5,7,25–28]. Среди этого довольно широкого семейства аксиально-симметричных структур к настоящему времени большое количество работ посвящено изучению так называемых реверсных цилиндрических кор/слой/оболочка-наноструктур β -CdS/ β -HgS/ β -CdS [10–13,29–33]. В этой структуре слой узкозонного

полупроводника (β -HgS, $E_g = 0.5$ eV) окружен ядром и внешним слоем из широкозонного полупроводника (β -CdS, $E_g = 2.5$ eV). Слой β -HgS в этой структуре для носителей заряда является квантовой ямой. Символ β здесь означает, что при дальнейшем рассмотрении для кристаллов CdS и HgS подразумевается их кубическая модификация (сфалерит, цинковая обманка).

В работах [10–12,29,32] приведены энергетические спектры свободных носителей заряда а также их связанных состояний в наноцилиндрических ядро/слой/оболочка-гетероструктурах на основе CdS/HgS/CdS. В работе [13] представлен также спектр фононов в названных структурах, а в работе [31] рассмотрено рамановское рассеяние в цилиндрической квантовой точке–квантовой яме CdS/HgS/CdS. В работах [33,34] изучены состояния носителей заряда в названных структурах с учетом сложной структуры валентной зоны и смешивания в ней дырочных состояний.

Наряду с названными и рядом других работ одним из авторов с соавторами в прежних работах были исследованы электрооптические переходы в цилиндрической ядро/слой/слой-структуре CdS/HgS/CdS, когда в структуре для носителей заряда реализуется режим сильного квантования [35–41]. Были рассмотрены случаи как однородного [35,36,39,41], так и неоднородного внешних электростатических полей [37,30,40,41].

Ясно, что описание состояний электронно-дырочной подсистемы в аксиально-симметричных структурах не может быть полным без рассмотрения случаев, когда необходимо учесть также и кулоновское взаимодействие между электроном и дыркой в пределах квантуемого

Таблица 1. Физические характеристики массивных полупроводников CdS и HgS. Данные взяты из [41,47-50]

Материал	Постоянная решетки, a_0 (nm)	Статическая диэлектрическая постоянная, γ	Эффективная масса электрона, μ_e/m_0	Эффективная масса дырки, μ_h/m_0	Ширина запрещенной зоны E_g (eV)	Энергетический разрыв ν -зоны, ΔU_c (eV)	Энергетический разрыв c -зоны, ΔU_v (eV)
CdS	0.5818	9.1	0.2	0.7	2.5	—	—
HgS	0.5851	18.2	0.036	0.044	0.5	1.2	0.8

Здесь: m_0 — масса свободного электрона.

слоя. Ограничимся обзором новейших исследований в этой области за последние годы. В работе [42] экспериментально исследованы экситонные состояния в слоистой цилиндрической нити на основе ZnO. Показано, что наличие локализованных экситонных состояний существенно корректирует оптические свойства этой структуры, что может иметь реальное применение при создании таких высокоэффективных оптоэлектронных приборов, как светодиоды и лазеры.

В работе [43] было изучено влияние термического воздействия на оптические свойства экситонов в цилиндрической структуре ZnO/ZnS и указаны возможности приборного применения подобной термомодуляции. Энергия связи экситонов с участием как тяжелых, так и легких дырок в цилиндрической слоистой структуре GaAs/Al_xGa_{1-x}As теоретически рассчитана в работе [44]. Там же получена также зависимость энергии связи экситона от радиуса ядра и толщины квантующего слоя. В приближении эффективной массы в работе [45] было проведено численное исследование экситонных состояний в цилиндрической структуре SiO₂/Si/SiO₂—квантовая точка—квантовая яма, показано влияние эффекта размерного квантования на энергию связи электронно-дырочной пары. В работе [46] было проведено исследование влияния нейтральных и заряженных экситонных состояний (трионов) на поведение осцилляций Ааронова—Бома в слоистой нанопроволоке. Одномерные экситонные состояния в цилиндрической ядро/слой/оболочка-структуре CdS/HgS/CdS при сильном квантовании поперечного движения носителей рассмотрены в работе [39].

В настоящей работе теоретически рассмотрены оптические переходы (поглощение и люминесценция) в квантующем слое HgS цилиндрической ядро/слой/оболочка-гетероструктуры CdS/HgS/CdS с учетом электростатического взаимодействия между электроном и дыркой при различных режимах размерного квантования движения носителей заряда в слое. Рассмотрение для электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне было проведено в рамках однозонных моделей в приближении эффективной массы с учетом кулоновского взаимодействия в экситоне.

Структура настоящей статьи следующая. В разделе 2 приводятся общие положения и приближения, касающиеся модельных приближений для рассматриваемой системы; в разделе 3 рассмотрены состояния носителей

заряда и оптические переходы в слое HgS при различных режимах размерного квантования; в разделе 4 обсуждаются полученные результаты, а в разделе 5 приводятся заключения относительно полученных в работе результатов.

2. Общие положения и приближения

В табл. 1 приведены необходимые в дальнейшем некоторые физические характеристики массивных полупроводников CdS и HgS.

Из приведенных данных ясно, что в радиальном направлении слой HgS играет роль двумерной квантовой ямы, а ядро и внешний слой—оболочка CdS, — роль двумерных барьеров. Для квантующего слоя HgS рассматривается случай прямой запрещенной зоны с неинвертированным порядком зон [49–51]. Если L есть область локализации частицы (в данном случае — толщина слоя), то режим размерного квантования движения носителей в самом общем случае определяется следующими критериями [53]:

а) Режим сильного квантования

$$L < a_e^{3D}, a_h^{3D}. \quad (1)$$

б) Режим умеренного квантования

$$a_h^{3D} < L < a_e^{3D}. \quad (2)$$

с) Режим слабого квантования

$$L > a_e, a_h^3. \quad (3)$$

В выражениях (1)–(3) величины — это боровские радиусы, соответственно, электрона и дырки.

Приведем также полученные при помощи табл. 1 экситонные характеристики компонент рассматриваемой структуры.

В качестве единицы длины (a_{et}) в дальнейшем мы будем использовать $3D$ -боровский радиус электрона в массивном кристалле HgS:

$$a_{et} \equiv a_e^{3D} = \frac{\gamma m_0}{\mu_e} 0.528 \cdot 10^{-8} \text{ cm} \approx 27 \text{ nm}. \quad (4)$$

А в качестве единицы энергии (E_{et}) выбрана ридберговская энергия электрона в массивном образце HgS:

$$E_{et} \equiv E_e^{3D} = \frac{\hbar^2}{2\mu_e (a_e^{3D})^2} \approx 1.5 \text{ meV}. \quad (5)$$

Таблица 2. Экситонные характеристики массивных образцов CdS и HgS

Материал	Энергия связи экситона, E_{ex}^{3D} (meV)	Боровский радиус экситона, a_{ex}^{3D} (nm)	Боровский радиус электрона, a_e^{3D} (nm)	Боровский радиус дырки, a_h^{3D} (nm)
CdS	27	3	2.4	0.69
HgS	0.81	50	2	22

Перейдем теперь к рассмотрению состояний носителей заряда в слое HgS при различных геометрических размерах образца, когда квантовый размерный эффект (КРЭ) в том или ином режиме проявляется по всем направлениям движения носителей заряда в пределах слоя.

Из табл. 2 очевидно, что при размерах кора и внешнего слоя $a > 3$ nm в компонентах CdS происходит связывание электрона и дырки в экситон и в них будет реализован режим слабого квантования. Т.е. в коре и внешнем слое КРЭ для отдельных носителей при $a > 3$ nm наблюдаться не будет. КРЭ для носителей заряда в чистом виде в этом случае будет проявляться именно в слое HgS. Чтобы исключить влияние на КРЭ эффектов туннелирования, размеры кора и внешнего слоя мы будем в дальнейшем предполагать значительно большими, чем толщина слоя (например, порядка 20 nm и более).

3. Состояния носителей заряда и оптические переходы в слое при различных режимах размерного квантования

3.1. Вдоль оси z реализуется режим сильного квантования, в радиальном направлении имеет место умеренное квантование

При данном рассмотрении мы предполагаем, что в направлении z также имеет место размерное квантование движения носителей заряда. Для определенности полагаем, что толщина системы в этом направлении $d = 10$ nm. При такой толщине в направлении z в компонентах CdS для носителей заряда будет реализован режим слабого квантования, а в компоненте HgS — режим сильного квантования. Т.е. кулоновским взаимодействием между электроном и дыркой вдоль оси симметрии в пределах слоя можно пренебречь. Для описания движения носителей в этом направлении воспользуемся общепринятым приближением бесконечно глубокой потенциальной ямы:

$$U(z) = \begin{cases} 0, & d > z > 0 \\ \infty, & z \leq 0, z \geq d \end{cases} \quad (6)$$

Для огибающих волновых функций и энергии движения носителей вдоль оси z в этом приближении можем

записать [41]:

$$u_{s_i}(z) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin \frac{\pi \varepsilon_i}{d} z; \quad E_{s_i} = \frac{\pi^2 \hbar^2 s_i^2}{2\mu_i d^2};$$

$$s_i = 1, 2, 3, \dots; \quad i = e, h. \quad (7)$$

Обратимся теперь к движению электронов и дырок в плоскости (r, φ) . Из табл. 1, 2 и условий (1)–(3) следует, что при изменении толщины рассматриваемого слоя в интервале

$$L < 22 \text{ nm} \quad (8)$$

для носителей заряда в слое будет реализован режим сильного квантования, а в интервале

$$22 \text{ nm} < L < 27 \text{ nm} \quad (9)$$

в радиальном направлении в слое должен быть реализован режим умеренного квантования. Однако в данном случае этот вопрос требует некоторого уточнения. Дело в том, что при сильном квантовании вдоль оси z электрон и дырка в плоскости (r, φ) связываются не в трехмерный, а в двумерный экситон [54]. Как известно, энергия связи $2D$ -экситона в 4 раза больше энергии связи $3D$ -экситона: $E_{e-h}^{2D} = 4E_{e-h}^{3D}$ [54]. Вследствие этого соответственно уменьшаются и „двумерные“ боровские радиусы $2D$ -экситона и носителей заряда: $a_{ex}^{3D} = 2a_{ex}^{2D}$; $a_{e,h}^{3D} = 2a_{e,h}^{2D}$. Так что, вместо условий (8), (9) для рассматриваемой системы в данном случае будем иметь более строгие условия:

$$L < 11 \text{ nm}, \quad (10)$$

$$11 \text{ nm} < L < 13.5 \text{ nm}. \quad (11)$$

Специфика движения при выполнении условия (10), т.е. в режиме сильного квантования, подробно рассмотрена в работе [47] и мы к ней более обращаться не будем.

Рассмотрим состояния носителей в слое, когда выполняется условие (11). Без учета кулоновского взаимодействия в радиальном направлении слой HgS аппроксимируем следующей потенциальной ямой [41]:

$$U(r) = \begin{cases} 0: & R_1 < r < R_2 \\ \Delta U_{c,v}; & r \leq R_1, r \geq R_2 \end{cases} \quad (12)$$

Здесь R_1, R_2 — соответственно внутренний и внешний радиусы слоя, а индексы c, v относятся, соответственно, к зоне проводимости и валентной зоне. При

принятых здесь размерах композиции (nm, nm) для энергии квантованного движения электронов и дырок вдоль радиальной переменной имеем, соответственно, следующие оценки:

$$E_c^{conf} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu - [e]L^2} \Big|_{L \sim 10-15 \text{ nm}} = 104.58 - 44.43 \text{ meV},$$

$$E_v^{conf} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu - [h]L^2} \Big|_{L \sim 10-15 \text{ nm}} = 85.55 - 37.98 \text{ meV}.$$

Так что, учитывая данные из табл. 1 и 2, для низших энергетических состояний движение в поле (12) с большой точностью можно рассматривать как движение в бесконечно глубокой потенциальной яме. С другой стороны, КРЭ, как известно, наиболее эффективно проявляется именно для не сильно возбужденных энергетических состояний. Так что, в дальнейшем для движения в радиальном направлении мы ограничимся первыми двумя энергетическими уровнями, которые будут рассчитаны в рамках модели бесконечно глубокой потенциальной ямы. Так как нас интересует специфика сугубо радиального движения, то в дальнейшем мы всюду будем предполагать, что азимутальное число $m = 0$.

Для огибающей радиальной волновой функции и энергии радиального движения в принятом приближении имеем [41]:

$$\Phi_{n_i}(r) = \sqrt{\frac{2}{Lr}} \sin \frac{\pi n_i (r - R_1)}{L};$$

$$E_{n_i} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n_i^2}{2\mu_i L^2}; \quad i = e, h. \quad (13)$$

Здесь $n_i = 1, 2$. Учтем теперь двумерное электростатическое взаимодействие между электроном и дыркой в плоскости (r, φ) , когда выполняется условие (11). Двумерный электростатический потенциал электронно-дырочного кулоновского взаимодействия представим в следующем виде:

$$U(\mathbf{r}_c, \mathbf{r}_v) = -\frac{e^2}{\gamma |\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_v|}; \quad \gamma = \frac{\gamma_{CdS} + \gamma_{HgS}}{2};$$

$$\mathbf{r}_{c,v} = \mathbf{r}_{c,v}(x_{c,v}, y_{c,v}, 0). \quad (14)$$

Здесь γ — усредненное значение диэлектрической постоянной компонент рассматриваемой композиции [55].

Так как дырка тяжелее электрона, то потенциал (14) усредняем по электронным состояниям из (13). В итоге получаем следующий результат: при толщине слоя из (11) дырка будет двигаться в следующем поле (см. Приложение А):

$$U_{e-h}(r_v) = \begin{cases} \langle U(r_v) \rangle: & R_1 < r_v < R_2 \\ \Delta U_v: & r_v \leq R_1, r_v \geq R_2. \end{cases} \quad (15)$$

Здесь

$$\langle U_{e-h}(r_v) \rangle = -\frac{e^2}{\gamma} \int \frac{|\Phi_{n_i}(r_c)|^2}{|\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_v|} d\mathbf{r}_c. \quad (16)$$

Таблица 3. Значения первых двух уровней энергии дырок в слое HgS при различных значениях толщины слоя без учета (E_h^{conf}) и при учете (E_{e-h})_{1,2} электростатического $e-h$ -взаимодействия (16)

Толщина слоя L (nm)	10	11	12	13	14	15
$(E_h^{conf})_1$ meV	85.55	70.66	59.37	50.65	43.63	37.98
$(E_h)_1$ meV	78.17	63.08	51.61	42.74	35.66	30.08
$(E_h^{conf})_2$ meV	342.21	282.66	237.49	202.58	174.52	151.94
$(E_h)_2$ meV	341.56	281.68	235.28	199.28	170.49	147.68

Используя полученное в **Приложении А** выражение (А.4), для потенциала (16) теперь можем записать:

$$\langle U_{e-h}(r_v) \rangle = -aE_{et} + \frac{bE_{et}}{a_{et}} r_v = -|V_0| + Fr_v. \quad (17)$$

Радиальное уравнение Шредингера для дырки (с азимутальным числом $m = 0$), движущейся в потенциальной яме (17) запишется в следующем виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_v} \frac{d^2 \chi(r_v)}{dr_v^2} + F\chi(r_v) = (E_v + |V_0|)\chi(r_v);$$

$$v = lh; \quad \chi(r_v = R_1) = \chi(r_v = R_2) = 0. \quad (18)$$

В табл. 3 приведены значения первых двух уровней энергии $E_v \equiv E_{e-h}$ из уравнения (18), полученные в результате численных расчетов (см. Приложение В, выражение (В. 4)). Для сравнения приведены также первые два значения энергии размерного квантования дырок (E_h^{conf})_{1,2} при той же толщине слоя без учета $e-h$ -взаимодействия.

Как видим, наиболее чувствительным к электронно-дырочному электростатическому взаимодействию является основное состояние. Физически это вполне понятно: при фиксированной ширине ямы, чем выше степень возбуждения, обусловленная размерным квантованием, тем в меньшей степени на это состояние будет воздействовать кулоновское $e-h$ -взаимодействие. С другой стороны, из таблицы видно также, что с увеличением ширины ямы степень воздействия $e-h$ -взаимодействия на уровень с фиксированным номером увеличивается. Это объясняется тем обстоятельством, что с увеличением ширины ямы энергия размерного квантования данного уровня с фиксированным номером уменьшается. Вследствие этого повышается степень воздействия электростатического взаимодействия на это состояние носителя. Расчеты также показывают, что под воздействием поля (16) максимум пространственного распределения дырки в слое смещается в сторону внутренней стенки слоя.

Рассмотрим теперь оптические переходы в слое при реализации условия квантования (11) в отсутствие и при наличии электростатического $e-h$ -взаимодействия.

Таблица 4. Значения пороговых частот для первых двух диагональных по радиальному числу ($n_c, n_h = 1.2; s_c, s_h = 1$) межзонных переходов в отсутствие ($\hbar\omega^{(0)}$) и при наличии $e-h$ -взаимодействия ($\hbar\omega^{e-h}$)

Толщина слоя L (nm)	10	11	12	13	14	15
$\hbar\omega_{1,1}^{(0)}$ (meV)	879.44	846.32	821.29	801.92	786.34	773.82
$\hbar\omega_{1,1}^{e-h}$ (meV)	872.06	838.79	813.53	794.01	778.38	765.91
$\hbar\omega_{2,2}^{(0)}$ (meV)	1449.36	1317.51	1217.15	1139.59	1077.24	1027.07
$\hbar\omega_{2,2}^{e-h}$ (meV)	1448.76	1316.43	1215.63	1136.21	1073.17	1022.79

а) Межзонное поглощение

Для оператора возмущения, связанного со световой волной

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{e}A_0 \exp[i(\omega t - \mathbf{q} \cdot \mathbf{r})] + \text{с. с.} \quad (19)$$

в дипольном приближении имеем [51]:

$$W = \frac{|e|A_0}{m_0c} (\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}). \quad (20)$$

Здесь A_0 — амплитуда вектора-потенциала падающей волны, \mathbf{e} — единичный вектор поляризации, \mathbf{p} — $3D$ — оператор импульса, $|e|$ — модуль заряда носителя, c — скорость света в вакууме, ω — частота падающей волны.

Коэффициент межзонного $|v\rangle \rightarrow |c\rangle$ перехода в отсутствие и при наличии $e-h$ -взаимодействия будет определяться, соответственно, следующими выражениями:

$$K_{c,h}^{(0)} \sim |W_{c,h}^{(0)}|^2 \delta_{n_c n_h} \delta(\hbar\omega - E_g^{\text{HgS}} - E_{n_c}^{\text{conf}} - E_{n_h}^{\text{conf}} - E_{s_c} - E_{s_h});$$

$$\langle U_{e-h}(r_v) \rangle = 0, \quad (21)$$

$$K_{c,h}^{e-h} \sim |W_{c,h}^{e-h}|^2 \delta(\hbar\omega - E_g^{\text{HgS}} - E_{n_c}^{\text{conf}} - (E_{e-h})_{n_h} - E_{s_c} - E_{s_h});$$

$$\langle U_{e-h}(r_v) \rangle \neq 0. \quad (22)$$

Здесь $W_{c,h}^{(0)}$ и $W_{c,h}^{e-h}$ — матричные элементы оператора (20), построенные на блоховских амплитудах v - и c -зон, соответственно без учета и с учетом взаимодействия (16).

Отметим, что наличие $e-h$ -взаимодействия отменяет правила отбора по радиальному числу и при $\langle U_{e-h}(r_v) \rangle \neq 0$ становятся возможными переходы между любыми состояниями радиального движения v - и c -зон. Однако, как показывают расчеты, интенсивность недиагональных переходов в этом случае на несколько порядков меньше интенсивности диагональных переходов и мы их рассматривать не будем.

В табл. 4 приведены значения пороговых частот для первых двух межзонных диагональных переходов (21) и (22), соответственно, без учета и с учетом взаимодействия (16).

Как видим, с увеличением толщины слоя разность между пороговыми частотами соответствующих диагональных межзонных переходов увеличивается. Как отмечалось выше, с увеличением толщины пленки энергия

размерного квантования уменьшается и, соответственно, увеличивается степень воздействия электростатического взаимодействия на состояние дырки, что приводит к уменьшению абсолютного значения ее энергии.

Рассмотрим теперь межзонное поглощение в реальном ансамбле, состоящем из рассматриваемых наноструктур с учетом дисперсии размеров последних. В соответствии с [56] для коэффициента поглощения запишем

$$K_{c,h}(\omega) \sim \sum |W_{c,h}|^2 \delta(\hbar\omega_{e,h} - E_g^{\text{HgS}} - E_e - E_h), \quad (23)$$

Уширение линий резонансного поглощения описывается заменой дельта-функции в выражении (23) лоренцевской кривой

$$\delta(\hbar\omega_{e,h} - E_g^{\text{HgS}} - E_e - E_h) \rightarrow \frac{\Gamma}{((\hbar\omega_{e,h} - E_g^{\text{HgS}} - E_e - E_h)^2 + \Gamma^2)}. \quad (24)$$

Здесь Γ — лоренцевский параметр уширения, который для расчетов, согласно [57] берем равным $\Gamma = 7 \text{ meV}$.

На рис. 1 приведены графики частотной зависимости межзонного поглощения при переходах в отсутствие и

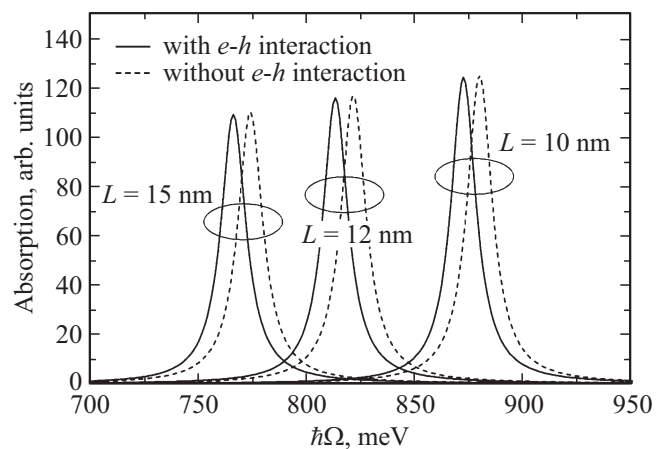


Рис. 1. Частотная зависимость межзонного поглощения для переходов $|n_v = 1; m_v = 0; s_v = 1\rangle \rightarrow |n_c = 1; m_c = 0; s_c = 1\rangle$ в слое β -HgS в отсутствие и при наличии взаимодействия (16) между электроном и дыркой при толщине слоя $L = 10, 12, 15 \text{ nm}$.

при наличии взаимодействия (16) между электроном и дыркой при различных значениях толщины слоя.

Как видим, пики межзонного поглощения при учете кулоновского взаимодействия смещаются в длинноволновую область.

б) Люминесценция

В качестве следующего шага исследования оптических свойств структуры CdS/HgS/CdS представим расчет спектра фотолюминесценции (ФЛ). Спектры ФЛ рассчитываем с использованием соотношения Резбрэка–Шокли [58, 59]:

$$R(\hbar\omega) \sim \hbar\omega K(\hbar\omega) \frac{f_c(1-f_v)}{f_v-f_c}, \quad (25)$$

Где f_c и $1-f_v$ соответственно вероятности того, что состояния зоны проводимости заняты, а состояния валентной зоны являются пустыми. Для высоких температур отношение $\frac{f_c(1-f_v)}{f_v-f_c}$ в соотношении Резбрэка–Шокли принимает бoльцмановскую форму.

На рис. 2 приведены кривые частотной зависимости процесса ФЛ для рассматриваемого случая.

Отметим, что кривые ФЛ были рассчитаны для комнатной температуры. Отдельные пики, соответствующие переходам, описанным в поглощающей части, видны на спектрах ФЛ. Как известно для высоких температур, отношение в соотношении Резбрэка–Шокли переходит в бoльцмановскую функцию распределения [58,59], вследствие чего в области высоких энергий пики практически не наблюдаются. Соответственно, пики низких энергий в спектрах ФЛ будут наблюдаться более четко, чем пики высоких энергий.

Зависимость интенсивности ФЛ от частоты падающего света для диагональных переходов электронов в дырочные состояния показана на рис. 2. Как видно из спектра ФЛ, при этих переходах с уменьшением параметра

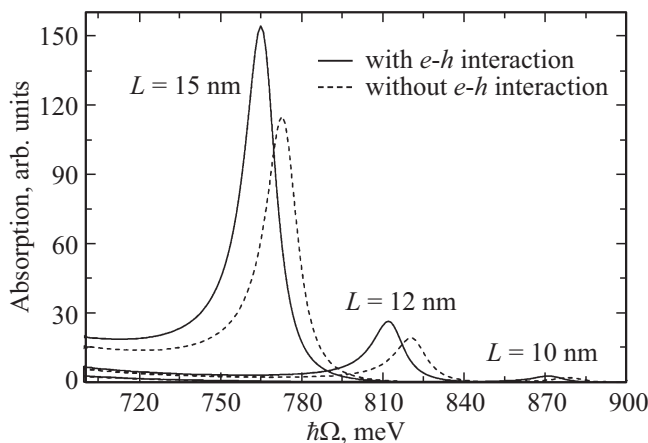


Рис. 2. Частотная зависимость полосы люминесценции в слое β -HgS в отсутствие и при наличии взаимодействия (16) между электроном и дыркой при толщине слоя $L = 10, 12, 15$ nm.

L интенсивность спектров ФЛ уменьшается. При учете взаимодействия между электроном и дыркой пороговая частота ФЛ смещается в область малых частот и процесс характеризуется увеличением интенсивности.

3.2. Вдоль оси z реализуется режим сильного квантования, в радиальном направлении имеет место слабое квантование

Если в направлении z по-прежнему выполняются условия (6), (7), а в радиальном направлении имеет место условие

$$L > a_e^{2D}, a_h^{2D}; \quad L > 13.5 \text{ nm}, \quad (26)$$

то в плоскости (r, ϕ) электрон и дырка будут связаны в двумерный экситон [54]. Полная энергия основного состояния связанной электронно-дырочной пары теперь будет следующей:

$$(E_{ex}^{2D})_{\min} = (E_{e,h}^{conf})_{\min} + 4E_{e,h}^{3D} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu_e d^2} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu_h d^2};$$

$$(E_{e,h}^{conf})_{\min} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2(\mu_e + \mu_h)L^2}. \quad (27)$$

Рассмотрим оптические переходы в слое, когда имеет место условие квантования (26).

а) Межзонное поглощение

При $d = 10$ nm, $L = 15$ nm, с учетом данных из табл. 1, 2, 3, для пороговой частоты межзонных переходов в основное $2D$ -экситонное состояние, соответственно будем иметь

$$(\hbar\omega_{ex}^{2D})_{\min} = E_g + (E_{e,h}^{conf})_{\min} + 4E_{ex}^{3D} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu_e d^2} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu_h d^2} = 739.93 \text{ meV}. \quad (28)$$

Из сравнения данных табл. 4 и результата (28) ясно, что с усилением экситонных эффектов пороговая частота межзонного перехода в низшее энергетическое состояние электроно-дырочной пары уменьшается

$$\hbar\omega_{1,1}^{(0)} : \hbar\omega_{1,1}^{e-h} : (\hbar\omega_{ex}^{2D})_{\min} = 773.82 : 765.91 : 739.93 \text{ meV}. \quad (29)$$

Кривая частотной зависимости межзонных переходов в этом случае будет модулироваться экситонным множителем основного состояния двумерного экситона Ванье–Мотта [54].

Зависимость люминесценции от энергии излучаемого фотона повторяет вид кривой на рис. 2 и мы здесь ее приводить не будем.

3.3. В радиальном направлении реализуется режим сильного квантования, а вдоль оси z электрон и дырка связываются в одномерный экситон

Запишем электростатическое взаимодействие между электроном и дыркой в слоев следующем виде:

$$U(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_v; z_e, z_v) = -\frac{e^2}{\gamma \sqrt{(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_v)^2 + (z_e - z_v)^2}};$$

$$\gamma = \frac{\gamma_{\text{Cds}} + H_{\text{HgS}}}{2};$$

$$\gamma = \frac{\gamma_{\text{Cds}} + \gamma_{\text{HgS}}}{2}; \quad \mathbf{r}_{c,v} = \mathbf{r}_{c,v}(x_{c,v}, y_{c,v}, 0). \quad (30)$$

Если в радиальном направлении для электронов и дырок реализуется режим сильного квантования, то взаимодействие между электроном и дыркой вдоль оси z можно учесть при помощи потенциала (30), усредненно по состояниям (13):

$$U(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_v; z_e, z_v) \equiv U(z_e z_v)$$

$$= -\frac{e^2}{\gamma} \int \frac{|\Phi_{n_e}(\mathbf{r}_e)|^2 |\Phi_{n_v}(\mathbf{r}_v)|^2 d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_v}{\sqrt{(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_v)^2 + (z_e - z_v)^2}}; \quad (31)$$

После соответствующих расчетов для потенциала (31) в явном виде получаем (см. Приложение С):

$$U(z_e, z_v) \equiv U(z_e - z_v)$$

$$\equiv -\frac{4\pi e^2}{\gamma R_1} x_1 \left[\alpha(x_1) + 2\beta(x_1) \frac{z^2}{2} \right] \quad (32)$$

Рассматривая движение вдоль оси системы в координатах

$$z = z_e - z_v; \quad Z = \frac{\mu_e z_e + \mu_h z_v}{M}; \quad M = \mu_e + \mu_h \quad (33)$$

мы приходим к следующим уравнениям Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}} \frac{d^2 g(z)}{dz^2} + U(z)g(z) = E_{ex}^{1D} g(z);$$

$$\mu_{e-h}^{-1} = \mu_e^{-1} + \mu_h^{-1} \quad (34)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 g(z)}{dz^2} + U(z)g(z) = E_N u(Z);$$

$$u(Z = d/2) = u(Z = -d/2) = 0; \quad N = 1, 2, 3, \dots \quad (35)$$

Уравнение (34) представляет собой уравнения осциллятора с частотой $\omega(x_1)$ и энергией E_{OSC} , соответственно

$$\omega(x_1) = \sqrt{\frac{8\pi e^2 x_1 \beta(x_1)}{\gamma R_1 \mu_{e-h}}}; \quad E_{ex} = E_{ex}^{1D} + \frac{4\pi e^2 x_1 \alpha(x_1)}{\gamma R_1} \quad (36)$$

Таблица 5. Значения энергий $(E_{ex}^{1D})_{\min}$ и $(E_{e-h}^{1D})_{\min}$ для значений толщины слоя $L = 5, 7, 10$ nm при $R_1 = 20$ nm и $d = 40$ nm

Толщина слоя L (nm)	5	7	10
$(E_{ex}^{1D})_{\min}$ (meV)	-4.724	-4.676	-4.362
$(E_{e-h}^{1D})_{\min}$ (meV)	-1.808	-1.76	-1.446

Таблица 6. Значения пороговых частот межзонных переходов без учета и с учетом кулоновского взаимодействия носителей вдоль оси z для значений толщины слоя $L = 5, 7, 10$ nm, $R_1 = 20$ nm и $d = 40$ nm

Толщина слоя L (nm)	5	7	10
$(\hbar\omega_{e,h}^{(0)})_{\min}$ (meV)	1258.328	886.74	773.82
$(\hbar\omega_{e,h}^{(0)})_{\min}$ (meV)	1256.712	885.18	772.374

Из уравнений (34), (35) получаем интересующее нас минимальное значение энергии движения электронно-дырочной пары в направлении оси системы при заданных размерах системы R_1, L, d :

$$(E_{e-h}^{1D})_{\min} = (E_{ex}^{1D})_{\min} + (E_N)_{\min}$$

$$= \frac{\hbar\omega(x_1)}{2} - \frac{4\pi e^2 x_1 |\alpha(x_1)|}{\gamma R_1} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2Md^2} \quad (37)$$

В табл. 5 приведены значения энергий (E_{ex}^{1D}) и (E_{e-h}^{1D}) для различных значений толщины слоя HgS.

Для сравнения отметим, что минимальное значение суммарной энергии $(W_{ses_h})_{\min} = (E_{s_e})_{\min} + (E_{s_h})_{\min}$ размерного квантования движения носителей вдоль оси z при тех же размерах системы равно: $(E_{ses_h}) = (E_{s_e})_{\min} + (E_{s_h})_{\min} = 11.782$ meV.

Из приведенных результатов ясно, что, во-первых, движение пары в плоскости (x, y) непосредственно влияет на их движение вдоль оси системы и исключает сингулярность одномерного потенциала электростатического взаимодействия между электроном и дыркой в точке, где координаты электрона и дырки совпадают $(z = 0)$. Во-вторых, чем меньше степень квантования движения носителей в плоскости (x, y) , тем меньше также и энергия связи пары в направлении z. Это вполне понятно, т.к. с уменьшением степени квантования поперечного движения носителей заряда, в этом направлении, соответственно, начинает возрастать роль кулоновского взаимодействия.

Для рассмотренного в этом разделе режима движения носителей для оптических переходов получаем следующие результаты:

a) Межзонное поглощение

В табл. 6 приведены значения пороговых частот межзонных переходов при рассмотренных в этом пункте

геометрических размерах системы без учета и с учетом кулоновского взаимодействия пары вдоль оси системы.

Как видим, связывание пары в одномерный экситон приводит к сужению ширины запрещенной зоны. Из табл. 6 видно, что положения пиков экситонного поглощения в данном случае определяется значением толщины слоя HgS. Зависимость люминесценции от энергии излучаемого фотона опять повторяет ход кривой на рис. 2. Пики излучения определяются значениями частот из табл. 6.

4. Обсуждение результатов

Перейдем теперь к обсуждению результатов, полученных в работе. Как уже отмечалось, в предыдущей работе авторов [47] были рассмотрены состояния носителей и оптические переходы в цилиндрической-гетероструктуре CdS/HgS/CdS для предельного случая сильного квантования движения носителей в слое, т.е. когда электростатическим взаимодействием между электроном и дыркой можно пренебречь. Ясно, что с уменьшением степени размерного квантования для возможно более точного теоретического описания состояний носителей уже с необходимостью возникает потребность в учете электростатического взаимодействия между электроном и дыркой.

В случае, когда вдоль оси симметрии системы реализуется режим сильного размерного квантования (выражение (7)), а в радиальном направлении, — режим умеренного размерного квантования (условие (11)), в радиальном направлении необходимо учесть кулоновское взаимодействие между электроном и дыркой (выражение (14)). Численные расчеты показывают, что этот „двумерный“ кулоновский потенциал, ограниченный стенками потенциальной ямы (12), (15), в пределах слоя с большой точностью аппроксимируется потенциалом с линейной зависимостью от радиальной переменной (выражения (A.5), (17), (18)). Причем форма профиля дна квантовой ямы зависит также и от толщины слоя, т.е. ширины квантовой ямы (таблица A.1). Для фиксированной толщины слоя HgS энергия электронно-дырочной пары при учете электростатического взаимодействия между ними оказывается меньше, чем, когда этим взаимодействием пренебрегаем. Физически это вполне понятно, т.к. притяжение между электроном и дыркой уменьшает кинетическую энергию частицы, вызванную размерным квантованием. С увеличением толщины слоя разность между невозмущенными и возмущенными значениями энергии пары увеличивается. Это объясняется тем обстоятельством, что с увеличением толщины слоя, — ширины ямы, — уменьшается роль размерного квантования, и, соответственно, увеличивается роль электростатического взаимодействия в формировании энергетического спектра носителей заряда (см. табл. 3). Одновременно, при фиксированной толщине слоя разность между невозмущенным и возмущенным

значениями энергии уменьшается с ростом номера невозмущенного уровня, т.к. при данном потенциале его воздействие на данный уровень будет тем меньше, чем больше кинетическая энергия частицы, которая определяется номером уровня размерного квантования (см. табл. 3).

Межзонное поглощение носит резонансный характер, и, в соответствии с вышесказанным, пороговые частоты межзонного поглощения при любых значениях толщины слоя из интервала (11) и фиксированной высоте квантующего цилиндра смещаются в область малых частот (табл. 4, рис. 1).

При неизменной высоте квантующего цилиндра ($d = 10 \text{ nm}$) увеличение толщины слоя (условие (26)) приводит к связыванию электрона и дырки в плоскости сечения системы в двумерный экситон. Энергия пары в основном состоянии оказывается меньше ее энергии не только без учета взаимодействия, но и энергии случая умеренного квантования (ср. таблицу 3 и выражение (28)). Это обусловлено тем, что, во-первых, при условии (26) в слое квантуется уже движение не каждого отдельного носителя, а центра тяжести пары, энергия квантования которого меньше суммарной энергии квантования движения двух отдельных частиц. Во-вторых, энергия связанного состояния здесь учитывается в виде отрицательного слагаемого. Интенсивность поглощения в этом случае определяется значением экситонного множителя $|\Psi_{ex}^{2D}(r_e = r_{th})|^2$ двумерного экситона. Пороговая частота поглощения еще больше сдвигается в длинноволновую область (ср. данные табл. 4 и выражения (29)).

Состояние пары и ее энергия существенно меняются в предельном случае, когда в радиальном направлении для носителей реализуется режим сильного квантования (условие (1)), а вдоль оси симметрии — режим слабого квантования (условие (3), $d = 40 \text{ nm}$). В этом случае потенциал электронно-дырочного взаимодействия имеет квазиодномерный характер и получается усреднением по состояниям движения носителей в плоскости сечения структуры (выражения (30), (31)). При помощи численных расчетов во-первых устанавливается, что потенциал притяжения между электроном и дыркой вдоль оси симметрии в этом случае является потенциальной ямой конечной глубины. И глубина этой квантовой ямы определяется радиальными размерами образца. Т.е. в рассматриваемом случае имеет место явная корреляция между радиальным движением носителей и их движением вдоль оси симметрии (выражение (C.4), рис. C.1). Во-вторых, при расчете энергии основного состояния квантовую яму (C.4) с большой точностью можно заменить осцилляторным потенциалом (выражения (C.6), (32), табл. C.1). При означенных размерах системы частота межзонного поглощения при учете квазиодномерного кулоновского притяжения между электроном и дыркой оказывается меньше пороговой частоты без учета экситонных состояний (табл. (6)).

5. Заключение

Относительно результатов, полученных в работе можно заключить следующее:

- комбинированием численных и аналитических расчетов получено точное теоретическое описание состояний носителей заряда в квантуемом слое HgS цилиндрической ядро/слой/оболочка-гетероструктуры CdS/HgS/CdS в различных режимах размерного квантования;

- учет электростатического притяжения между электроном и дыркой позволяет с большей точностью определить интервал частот оптических переходов в структуре для каждого из режимов размерного квантования, в частности, получена величина смещения пороговой частоты для каждого случая;

- наличие корреляции между движениями носителей заряда в радиальном и осевом направлениях движения носителей дает возможность путем варьирования размеров образца в указанных направлениях регулировать изменением частоты переходов в образце.

Приложение А

Расчет усредненного потенциала из выражений (14), (16)

В триангулярных координатах имеем

$$|\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_v| = \sqrt{r_c^2 + r_v^2 - 2r_c r_v \cos \alpha}. \quad (A.1)$$

Здесь α — угол между векторами $\mathbf{r}_e = \mathbf{r}_c(x_c, y_c, 0)$ и $\mathbf{r}_v(x_v, y_v, 0)$. Подставляя (13) и (A.1) в (16), приходим к следующему промежуточному результату

$$\langle U_{e-h}(r_v) \rangle = -\frac{2e^2}{\gamma L} \times \left\{ \int_{R_1}^{R_2} \left[\frac{1}{r_c + r_v} - \frac{\cos \frac{2\pi - n_c(r_c - R_1)}{L}}{r_c + r_v} \right] F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) dr_c \right\}; \quad (A.2)$$

$$k^2 = \frac{4r_c r_v}{(r_c + r)^2}.$$

Здесь $F(\frac{\pi}{2}, k)$ — неполный эллиптический интеграл первого рода.

Учитывая теперь, что с очевидностью $k < 1$, для расчета интегралов в выражении (A.2) воспользуемся асимптотическим разложением эллиптического интеграла при малых значениях параметра [60]. В итоге получаем

$$\langle U_{e-h}(r_v) \rangle = -\frac{e^2}{\gamma} \int \frac{|\Phi_{n_e}(r_c)|^2}{|\mathbf{r}_c - \mathbf{v}|} d\mathbf{r}_c = -\frac{e^2(l_1 - l_2)}{\gamma(R_2 - R_1)};$$

$$l_1 = \pi \left[\ln \frac{R_2 + r_v}{R_1 + r_v} + \frac{r_v(R_2 - R_1)}{(R_1 + r_v)(R_2 + r_v)} \right]$$

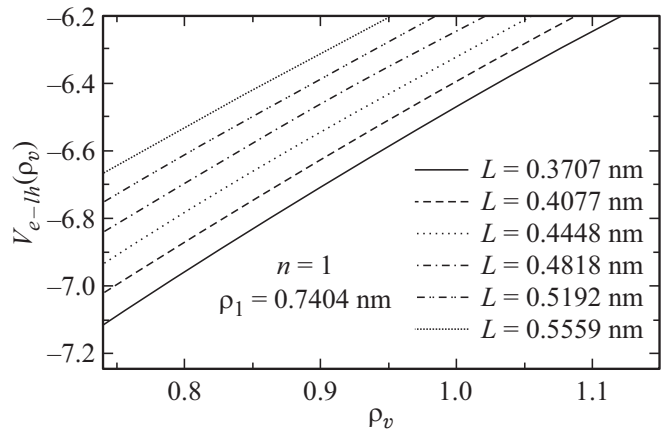


Рис. А.1. Графики функций (A.4) при $n_c = 1$.

$$l_2 = \pi \cos \frac{2\pi n_c R_1}{L} \left\{ \cos \frac{2\pi n_c r_v}{L} \left[\text{ci} \left(\frac{2\pi n_c r_2}{L} + \frac{2\pi n_c r_v}{L} \right) - \text{ci} \left(\frac{2\pi n_c R_1}{L} + \frac{2\pi n_c r_v}{L} \right) \right] + \sin \frac{2\pi n_c r_v}{L} \times \left[\text{si} \left(\frac{2\pi n_c R_2}{L} + \frac{2\pi n_c r_v}{L} \right) - \text{si} \left(\frac{2\pi n_c R_1}{L} + \frac{2\pi n_c r_v}{L} \right) \right] \right\} + \pi \sin \frac{2\pi n_c r_v}{L} \left\{ \sin \frac{2\pi n_c r_v}{L} \left[\text{ci} \left(\frac{2\pi n_c R_1}{L} + \frac{2\pi n_c r_v}{L} \right) - \text{ci} \left(\frac{2\pi n_c R_2}{L} + \frac{2\pi n_c r_v}{L} \right) \right] + \cos \frac{2\pi n_c r_v}{L} \times \left[\text{si} \left(\frac{2\pi n_c R_2}{L} - \frac{2\pi n_c r_v}{L} \right) - \text{si} \left(\frac{2\pi n_c R_1}{L} + \frac{2\pi n_c r_v}{L} \right) \right] \right\} \quad (A.3)$$

Здесь $\text{si}(x)$, $\text{ci}(x)$ интегральные синус и косинус, соответственно. В безразмерных единицах для потенциала (A.3) получаем

$$V_{e-h}(\rho_v, \rho_1, \rho_2) = \frac{\langle U_{e-h}(r_v, R_1, R_2) \rangle}{E_{et}} = -\frac{e^2[l_1(\rho_v, \rho_1 \rho_2) - l_2(\rho_v, \rho_1 \rho_2)]}{\gamma E_{et}(\rho_2 - \rho_1)}; \quad (A.4)$$

На рис. А.1 представлены графики функций (A.4)

Как видим, зависимость потенциала (A.4) от радиуса дырки практически является линейной. Это позволяет с большой точностью громоздкие выражения (A.3), (A.4) экстраполировать простой линейной функцией:

$$V_{e-h}(\rho_v) \approx -|a| + b\rho_v. \quad (A.5)$$

Таблица А.1. Минимальные и максимальные значения потенциала Exp. (A.4) и соответствующая величина параметра a и b при различных значениях толщины слоя HgS

Толщина слоя L (nm)	10	11	12	13	14	15
$V_{e-h} _{\min}$	-7.1161	-7.0204	-6.9274	-6.8373	-6.7491	-6.6648
$V_{e-h} _{\max}$	-6.2203	-6.0712	-5.9289	-5.7936	-5.6631	-5.5408
a	-8.8911	-8.7316	-8.5729	-8.4211	-8.2785	-8.1391
b	2.4171	2.3331	2.2476	2.1673	2.0963	2.0249

В таблице А.1 приведены значения параметров a и b при различных значениях толщины слоя.

Приложение В

Решение уравнения (18)

Введя переменную из (18) приходим к следующему уравнению:

$$\xi = (r_v - \frac{E}{F}) \left(\frac{2\mu_h F}{\hbar^2} \right)^{1/\beta}, \quad (E = E_{e-h} + |V|)$$

$$\frac{d^2 \chi(\xi)}{d\xi^2} - \xi \chi(\xi) = 0. \quad (\text{B.1})$$

Решения этого уравнения даются, как известно [61], линейной комбинацией функций Эйри первого $\text{Ai}(\xi)$ и второго $\text{Bi}(\xi)$ рода

$$\chi(\xi) = C_1 \text{Ai}(\xi) + C_2 \text{Bi}(\xi). \quad (\text{B.2})$$

Здесь C_1, C_2 — нормировочные постоянные. Учитывая граничные условия (18), для волновых функций (B.2) имеем

$$\chi(\xi_1) = \chi(\xi_2) = 0;$$

$$\xi_{1,2} = \left(R_{1,2} - \frac{E}{F} \right) \left(\frac{2\mu_h F}{\hbar^2} \right)^{1/\beta}. \quad (\text{B.3})$$

Отсюда для определения энергетического спектра приходим к следующему выражению:

$$\frac{\text{Ai}[(1.222)^{1/\beta}(\rho_1 b^{1/\beta} - \varepsilon b^{-2\beta})]}{\text{Ai}[(1.222)^{1/\beta}(\rho_2 b^{1/\beta} - \varepsilon b^{-2\beta})]} = \frac{\text{Bi}[(1.222)^{1/\beta}(\rho_1 b^{1/\beta} - \varepsilon b^{-2\beta})]}{\text{Bi}[(1.222)^{1/\beta}(\rho_2 b^{1/\beta} - \varepsilon b^{-2\beta})]},$$

$$\rho_{1,2} = \frac{R_{1,2}}{a_{et}}; \quad \varepsilon = \frac{E}{E_{et}} \quad (\text{B.4})$$

Решения этого трансцендентного уравнения представляют собой искомую энергию.

Приложение С

Расчет усредненного потенциала (31)

Как уже неоднократно отмечалось, в данной работе нас интересует основное состояние носителей заряда в различных режимах. С учетом сказанного для выражения (31) в явном виде будем иметь

$$\bar{U}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_v; z_e, z_v) \equiv U(z_e, z_v)$$

$$= -\frac{4e^2}{\gamma L^2} \int \frac{\sin^2 \frac{\pi(r_e - R_1)}{L} \sin^2 \frac{\pi(r_v - R_1)}{L}}{r_e r_v \sqrt{(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_v)^2 + (z_e - z_v)^2}} d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_v. \quad (\text{C.1})$$

Рассматривая движение в плоскости (x, y) в треугольных координатах (A.1), приходим к следующему промежуточному результату

$$\bar{U}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_v; z_e, z_v) \equiv U(z_e, z_v)$$

$$= -\frac{4\pi e^2}{\gamma L^2} \int \frac{\sin^2 \frac{\pi(r_e - R_1)}{L} \sin^2 \frac{\pi(r_v - R_1)}{L}}{\sqrt{(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_v)^2 + (z_e - z_v)^2}} F\left(\frac{\pi}{2}; K\right) dr_e dr_v;$$

$$K^2 = \frac{4r_e r_v}{(r_e - r_v)^2 + (z_e + z_v)^2}. \quad (\text{C.2})$$

Здесь $F(\frac{\pi}{2}; K)$ — неполный эллиптический интеграл первого рода. Воспользовавшись теперь асимптотическим поведением функции $F(\frac{\pi}{2}; K)$ при малых значениях аргумента, вместо (C.2) будем иметь

$$U(z_e, z_v) \equiv U(t)$$

$$= -\frac{4\pi e^2 x_1}{\gamma R_1} \int_0^1 \int_0^1 \frac{\sin^2 \pi x_e \sin^2 \pi x_v}{\sqrt{(x_e + x_v + 2x_1)^2 + t^2}} dx_e dx_v$$

$$= -\frac{4\pi^2 e^2 x_1}{\gamma R_1} I_0(x_1, t). \quad (\text{C.3})$$

Заменим в этом интеграле функции $\sin^2 \pi x_e, \sin^2 \pi x_v$ их средними значениями в области интегрирования $x_e, x_v \in [0; 1]$: $\langle \sin^2 x_{e,v} \rangle = \frac{1}{2}$. Для соответствующего ин-

Таблица С.1. Значения параметров α и β при внутреннем радиусе композиции $R_1 = 20$ nm для значений толщины слоя $L = 5, 7, 10$ nm и высоте вдоль оси симметрии $d = 40$ nm

Толщина слоя L (nm)	5	7	10
α	-0.027835	-0.035837	-0.050339
β	0.0001736	0.0003720	0.0010417

теграла получаем:

$$\begin{aligned}
 I_1(x_1, t) &= \frac{1}{4} \int_0^1 \int_0^1 \frac{dx_e dx_v}{\sqrt{(x_e + x_v + 2x_1)^2 + t^2}} \\
 &= \frac{1}{4} \left\{ 2x_1 \ln \left[2x_1 + \sqrt{(2x_1)^2 + t^2} \right] - \sqrt{(2x_1)^2 + t^2} \right\} \\
 &\quad + \frac{1}{4} \left\{ 2x_1 + 2 + \ln \left[2x_1 + 2 + \sqrt{(2x_1 + 2)^2 + t^2} \right] \right. \\
 &\quad \left. - \sqrt{(2x_1 + 2)^2 + t^2} \right\} \\
 &\quad - \frac{1}{2} \left\{ 2x_1 + 1 + \ln \left[2x_1 + 1 + \sqrt{(2x_1 + 2)^2 + t^2} \right] \right. \\
 &\quad \left. - \sqrt{(2x_1 + 1)^2 + t^2} \right\} \tag{C.4}
 \end{aligned}$$

На рис. С.1 приведены графики функций $I_0(x_1, t)$ и $I_1(x_1, t)$ при различных геометрических размерах образца.

Как видим, результаты приближенно-аналитических и точных численных расчетов полностью совпадают. В дальнейших расчетах мы будем пользоваться аналитическим выражением (С.4). Так как нас интересует

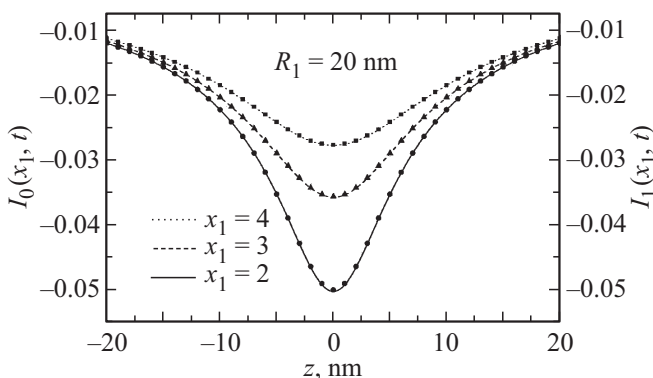


Рис. С.1. Графики функций $I_0(x_1, t)$ — совокупность точек, и $I_1(x_1, t)$ — сплошная линия при значении параметра $x_1 = 4, 3, 2$ ($L = 5, 7, 10$ nm $R_1 = 20$ nm) для интервала значений переменной $t \in [-4, +4]$, т.е. для интервала $(z_e - z_v) = z \in [-20$ nm; $+20$ nm].

наинизшее, — основное энергетическое состояние $e-h$ пары, т.е значения энергии вблизи минимума потенциала (С.1), разложим функцию

$$U(z_e - z_v) \equiv U(t) = \frac{4\pi e^2}{\gamma R_1} x_1 I_1(x_1, t) \tag{C.5}$$

в ряд вокруг точки минимума $t_0 = 0$. В результате получаем

$$U(t) \simeq x_1 [\alpha(x_1) + \beta(x_1)t^2] \tag{C.6}$$

Здесь

$$\begin{aligned}
 \alpha(x_1) &= \frac{1}{2} \{ x_1 \ln[4(x_1+1)] + x_1 \ln[4(x_1 + 1)] \\
 &\quad - \ln[2(2x_1 + 1)] - 2x_1 \ln[2(2x_1 + 1)] \} \\
 \beta(x_1) &= \frac{1}{8(1 + 2x_1)} - \frac{1}{32x_1} - \frac{1}{32(1 + x_1)}.
 \end{aligned}$$

В табл. С.1 приведены значения параметров α и β при различных геометрических размерах образца.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] G. Schmid. Nanoparticles: From Theory to Application, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA (2004). 445 p.
- [2] D. Li. Quantum-Dot Quantum Well (QDQW Nanoparticles). Encyclopedia of Microfluidics and Nanofluidics. Springer, Boston, MA (2008). 2226 p.
- [3] M. Henini. Handbook of Self Assembled Semiconductor Nanostructures for Novel Devices in Photonics and Electronics, Elsevier (2011). 864 p.
- [4] R.Gh. Chaudhuri, S. Paria. Chem. Rev. **112**, 2373 (2012).
- [5] K. Chatterjee, S. Sarkar, K.J. Rao, S. Paria. Adv. Colloid Interface Sci. **209**, 8 (2014).
- [6] P. Mélinon, S. Begin-Colin, J.-L. Duvail, F. Gauffre, N. Herlin-Boime, G. Ledoux, J. Plain, P. Reiss, F. Sully, B. Warot-Fonrose. Phys. Rep. **543**, 3, 163 (2014).
- [7] K. McNamara, S.A.M. Tofail. Adv. Phys. X **2**, 1, 54 (2017).
- [8] Nanocrystal Quantum Dots/ Ed. V.I. Klimov, 2nd ed. CRC Press (2010). 485 p.
- [9] A.R. Abou-Elhamd, K.A. Al-Sallal, A. Hassan. Energies **12**, 6, 1058 (2019).
- [10] Н.В. Ткач, И.В. Пронишин, А.М. Маханец. ФТТ **40**, 3, 557, (1998).
- [11] N.V. Tkach, A.M. Makhanets, G.G. Zegrya. Semicond. Sci. Technol. **15**, 4, 395 (2000).
- [12] Н.В. Ткач, А.М. Маханец, Г.Г. Зегря. ФТП **36**, 5, 543 (2002).
- [13] O.M. Makhanets, O.M. Voitsekhivska, A.M. Gryschyk. Condens. Matter Phys. **9**, 4(48), 719 (2006).
- [14] R.M. Ho, C.K. Chen, Y.W. Chiang, B.T. Ko, C.C. Lin. Adv. Mater. **18**, 18, 2355 (2006).
- [15] H. Simchi, M. Smaeilzadeh, M. Saani. Opt. Photon. J. **1**, 1, 5 (2011).
- [16] A. Deyasi, N.R. Das. Ann. IEEE India Conf. (INDICON) 312 (2012).
- [17] K.D. Sattler. Handbook of Nanophysics: Nanoparticles and Quantum Dots. CRC Press (2016). 716 p.

- [18] F. Xu, R. Abdelmoula, M. Potier-Ferry. *Int. J. Solids Struct.* **126**, 17 (2017).
- [19] K.H. Kim, Y.S. No. *Nano. Convergence* **4**, 32 (2017).
- [20] M. Kouhi. *Int. J. Mod. Phys. B* **31**, 23, 1750164 (2017).
- [21] X. Li. *J. Phys. D* **41**, 193001 (2008).
- [22] B.H. Badada, T. Shi, H.E. Jackson, L.M. Smith, C. Zheng, J. Etheridge, Q. Gao, H.H. Tan, Ch. Jagadish. *Nano Lett.* **15**, 12, 7847 (2015).
- [23] Q. Xiong, C.A. Grimes, M. Zacharias, A. Fontcubertai Morral, K. Hiruma, G. Shen. *J. Nanotechnology* **2012**, 2 (2012).
- [24] M. Zervos. *Nanoscale Res. Lett.* **9**, 1, 509 (2014).
- [25] M. Yu, Y. Huang, J. Ballweg, H. Shin, M. Huang, D.E. Savage, M.G. Lagally, E.W. Dent, R.H. Blick, J.C. Williams. *ACS Nano* **5**, 4, 2447 (2011).
- [26] S. Sharma, V. Koul, N. Singh. *ACS Omega* **2**, 10, 6455, (2017)
- [27] B. Tian, C.M. Lieber. *Annu. Rev. Anal. Chem.* **6**, 31 (2013).
- [28] C.M. Lukehart, R.A. Scott. *Nanomaterials: Inorganic and Bioinorganic Perspectives*. John Wiley & Sons (2013). 936 p.
- [29] Н.В. Ткач, В.А. Головацкий. *ФТТ* **43**, 2, 350–356 (2001).
- [30] I. Chakraborty, D. Mitra, S.P. Moulik. *J. Nanoparticle Res.* **7**, 227 (2005).
- [31] Q.H. Zhong, C.-H. Liu. *Thin Solid Films* **516**, 10, 3405 (2008).
- [32] S.J. Edrissi, S. M'zerd, I. Zorkani, K. Rahmani, Y. Chrafi, A. Jorio, M. Khenfouch. *J. Phys.: Conf. Ser.* **1292**, 012004 (2019).
- [33] М.А. Семина, Р.А. Сурис. *ФТП* **45**, 7, 947 (2011).
- [34] W. Jaskólski, G.W. Bryant. *Phys. Rev. B* **57**, 8, R4237 (1998).
- [35] V.A. Harutyunyan, E.M. Kazaryan, A.A. Kostanyan, H.A. Sarkisyan. *Physica E* **36**, 114 (2007).
- [36] V.A. Harutyunyan. *Physica E* **41**, 695 (2009).
- [37] V.A. Harutyunyan. *Appl. Surf. Sci.* **256**, 455 (2009).
- [38] V.A. Harutyunyan, G.H. Demirjian, N.H. Gasparyan. *Physica E* **43**, 614 (2010).
- [39] V.A. Harutyunyan. *J. Appl. Phys.* **109**, 014325 (2011).
- [40] V.A. Harutyunyan. *Physica E* **57**, 69 (2014).
- [41] V.A. Harutyunyan. *Effect of Static Electric Fields on The Electronic and Optical Properties of Layered Semiconductor Nanostructures. Part I: Effect of Static Electric Fields on The Electronic Properties of Layered Semiconductor Nanostructures*. Bentham Science Publishers (2015). 245 p.
- [42] R. Chen, Q.-L. Ye, T. He, V.D. Ta, Y. Ying, Y.Y. Tay, T. Wu, H. Sun. *Nano Lett.* **13**, 2, 734 (2013).
- [43] R. Li, Z. Wie, F. Zhao, X. Gao, X. Fang, Y. Li, X. Wang, J. Tang, D. Fang, H. Wang, R. Chen, X. Wang. *Nanophotonics* **6**, 5, 1093 (2016).
- [44] H. Sun, Zh. Wu, Q. Tian. *Int. J. Mod. Phys. B* **31**, 28, 1750209 (2017).
- [45] M. El-Yadri, E. Feddi, N. Aghoutane, A. El Aouami, A. Radu, F. Dujardin, Ch.V. Nguyen, H.V. Phuc, C.A. Duque. *J. Appl. Phys.* **124**, 144303, (2018).
- [46] P. Corfdir, O. Marquardt, R.B. Lewis, C. Sinito, M. Ramsteiner, A. Trampert, U. Jahn, L. Geelhaar, O. Brandt, V.M. Fominet. *Adv. Mater.* **31**, 3, 1805645 (2019).
- [47] V.A. Harutyunyan, D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan. *J. Contemp. Phys.* **53**, 1, 48 (2018).
- [48] D. Schooss, A. Mews, A. Eychmuller, H. Weller. *Phys. Rev. B* **49**, 24, 17072 (1994).
- [49] A. Mews, A.V. Kadavanich, U. Banin, A.P. Alivisatos. *Phys. Rev. B* **53**, 20, R13242 (1996).
- [50] F. Benhaddou, I. Zorkani, A. Jorio. *AIP Adv.* **7**, 065112 (2017).
- [51] F. Viot, R. Hayn, M. Richter, J. van den Brink. *Phys. Rev. Lett.* **106**, 236806 (2011).
- [52] A. Svane, N.E. Christensen, M. Cardona, A.N. Chantis, M. van Schilfgaarde, T. Kotani. *Phys. Rev. B* **84**, 205205, (2011).
- [53] Ал.Л. Эфрос, А.Л. Эфрос. *ФТП* **16**, 7, 1209 (1982).
- [54] Э.М. Казарян, Р.Л. Энфиаджян. *ФТП* **5**, 11, 2002 (1971).
- [55] E. Assaidi, E. Feddi, J.El. Khamkhami, F. Dujardin. *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, 175 (2003).
- [56] А.И. Ансельм. *Введение в теорию полупроводников*. Наука, М. (1978). 616 с.
- [57] W. Wichiansee, M.N. Nordin, M. Green, R.J. Curry. *J. Mater. Chem.* **21**, 20, 7331 (2011).
- [58] W. Van Roosbroeck, W. Shockley. *Phys. Rev.* **94**, 6, 1558, (1954).
- [59] R. Bhattacharya, B. Pal, B. Bansal. *App. Phys. Lett.* **100**, 22, 222103, (2012).
- [60] Е. Янке, Ф. Эмде, Ф. Леш. *Специальные функции*. Наука, М. (1964). 344 с.
- [61] М. Абрамовиц, И. Стиган. *Справочник по специальным функциям*. Наука, М. (1979). 832 с.

Редактор Ю.Э. Кутаев