

## Особенности электронного спектра в квантовой точке «ядро/оболочка» типа I

С.Е.Игошина, А.А.Карманов

*Предложена модель, позволяющая решить задачу о нахождении энергетического спектра и волновой функции электрона в квантовой точке «ядро/оболочка» типа I. Показано, что размеры ядра и оболочки могут служить управляющими параметрами для оптимизации энергетической структуры квантовой точки с целью получения реальных структур с заданными электрофизическими и оптическими свойствами.*

**Ключевые слова:** квантовая точка «ядро/оболочка» типа I, уравнение Шредингера, энергетический спектр, волновая функция.

Квантовые точки (КТ) находят все более широкое применение в устройствах опто- и наноэлектроники [1–3]. Среди всего многообразия квантовых точек можно выделить несколько основных типов, которые наиболее часто используются в экспериментальных исследованиях и практических приложениях. Прежде всего, это нанокристаллы в стеклах и матрицах широкозонных диэлектриков [4]. Другим важным типом квантовых точек являются так называемые самоорганизующиеся квантовые точки, которые изготавливаются методами Фольмера–Вебера и Странски–Крастанова с помощью методов молекулярно-лучевой и газофазной эпитаксии [5]. Этому типу квантовых точек посвящено множество экспериментальных и теоретических работ [6, 7]. Последние достижения в области нанотехнологии позволяют говорить о появлении нового класса квантовых точек – коллоидных нанокристаллов.

В 1993 г. Бавенди с соавторами описали метод синтеза высококачественных гомогенных полупроводниковых нанокристаллов из CdSe [8]. Такие квантовые точки имели хорошую кристаллическую структуру и узкое распределение по размерам, однако были слабофлуоресцирующими (квантовый выход около 10%). Принципиальный прорыв последовал после покрытия ядра оболочкой из другого материала с большей шириной запрещенной зоны (ZnS), что позволило обеспечить квантовый выход их флуоресценции (после оптимизации технологии) свыше 80% при комнатной температуре [9]. Такие структуры получили название квантовые точки «ядро/оболочка» типа I (core/shell QDs). Необходимо отметить, что, несмотря на большое количество экспериментальных работ, посвященных получению и исследованию коллоидных нанокристаллов, теоретических исследований достаточно мало. Авторы [10–12] при описании квантовых точек «ядро/оболочка» рассматривают туннелирование электрона из ядра КТ сквозь оболочку во внешнюю среду.

Реальные коллоидные нанокристаллы получают в виде зольей, при этом туннелирование становится невозможным, поскольку стабилизирующее КТ вещество чаще всего является диэлектриком [13].

Цель настоящей работы – построение теории энергетического спектра уровней в квантовой точке «ядро/оболочка» типа I (рис.1). Будет показано, что благодаря наличию оболочки из материала с большей, чем у ядра, шириной запрещенной зоны, возникают дополнительные возможности управления положением квантовых уровней.

Расчет энергетического спектра и волновых функций электрона в КТ проводим в модели «жестких» стенок. Запишем стационарное уравнение Шредингера в приближении эффективной массы:

$$-\frac{\hbar^2}{2m(r)}\nabla^2\psi + U(r)\psi = E\psi.$$

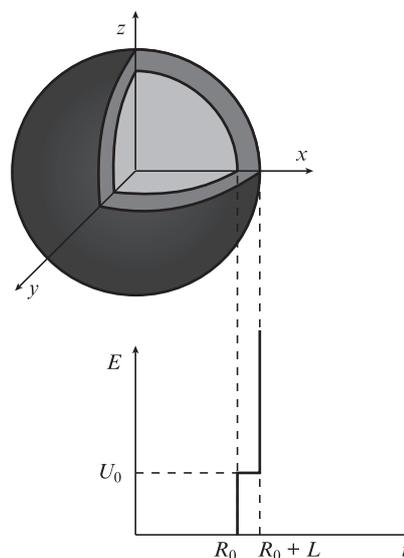


Рис.1. Схематическое изображение квантовой точки «ядро/оболочка» типа I и вид потенциальной энергии электрона как функции радиуса:  $U_0$  – высота потенциального барьера;  $R_0$  – радиус ядра;  $L$  – толщина оболочки.

С.Е.Игошина, А.А.Карманов. Пензенский государственный университет, Россия, 440026 Пенза, ул. Красная, 40; e-mail: sigoshina@mail.ru

Поступила в редакцию 7 июля 2012 г.

Потенциал  $U(r)$  и эффективная масса электрона  $m(r)$  внутри квантовой точки имеют вид

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq R_0, \\ U_0, & R_0 < r \leq R_0 + L, \\ \infty, & r > R_0 + L, \end{cases}$$

$$m(r) = \begin{cases} m_1^*, & R \leq R_0, \\ m_2^*, & R_0 < r \leq R_0 + L, \end{cases}$$

где  $U_0$  – высота потенциального барьера;  $m_1^*$  и  $m_2^*$  – эффективные массы электрона внутри ядра и оболочки соответственно.

С учетом сферической симметрии, а также вида потенциала находим решение уравнения Шредингера, пользуясь методом разделения переменных:

$$\psi_{lm}^{(i)}(r, \theta, \phi) = R_l^{(i)}(r) Y_{lm}(\theta, \phi),$$

где  $R_l^{(i)}(r)$  – радиальная часть волновой функции в соответствующих областях ( $i = 1$  – ядро,  $i = 2$  – оболочка);  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  – сферические гармоники;  $l = 0, 1, 2, \dots$  и  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$  – орбитальное и магнитное квантовые числа.

Радиальные части  $R_l^{(i)}(r)$  удовлетворяют уравнению для функции Бесселя:

$$\frac{\partial^2 R_l^{(1)}(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R_l^{(1)}(r)}{\partial r} + \left[ k_1^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l^{(1)}(r) = 0 \quad (1)$$

внутри ядра КТ,

$$\frac{\partial^2 R_l^{(2)}(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R_l^{(2)}(r)}{\partial r} + \left[ k_2^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l^{(2)}(r) = 0 \quad (2)$$

внутри оболочки КТ, где

$$k_1^2 = \frac{2m_1^*}{\hbar^2} E, \quad k_2^2 = \frac{2m_2^*}{\hbar^2} (E - U_0)$$

– квадраты волновых чисел внутри ядра и внутри оболочки КТ соответственно.

С учетом решений уравнений (1) и (2) имеем

$$\psi_{lm}^{(i)} = \begin{cases} C_1 j_l(k_1 r) Y_{lm}(\theta, \phi), & r \leq R_0, \\ C_2 j_l(k_2 r) Y_{lm}(\theta, \phi), & R_0 < r \leq R_0 + L. \end{cases}$$

Здесь  $C_1, C_2$  – нормировочные коэффициенты, определяемые из условия равенства волновых функций на границе раздела ядро – оболочка, а также нормировки на дискретный спектр:

$$C_1 j_l(k_1 R_0) = C_2 j_l(k_2 R_0), \quad (3)$$

$$m_2 C_1 \frac{dj_l(k_1 r)}{dr} \Big|_{r=R_0} = m_1 C_2 \frac{dj_l(k_2 r)}{dr} \Big|_{r=R_0}, \quad (4)$$

$$\int_0^{R_0+L} R_l^{(i)}(r) r^2 dr = 1.$$

Исходя из изложенного, волновую функцию электрона для квантовой точки «ядро/оболочка» типа I можно представить в виде

$$\psi(r, \theta, \phi) = \begin{cases} C_1 j_l(k_1 r) Y_{lm}(\theta, \phi), & r \leq R_0, \\ C_1 \frac{j_l(k_1 R_0)}{j_l(k_2 R_0)} j_l(k_2 r) Y_{lm}(\theta, \phi), & R_0 < r \leq R_0 + L, \\ 0, & r > R_0 + L, \end{cases}$$

где

$$C_1 = \frac{j_l(k_2 R_0) \sqrt{2}}{\sqrt{R_0^3 j_l^2(k_2 R_0) a_l + j_l^2(k_1 R_0) [(R_0 + L)^3 b_l - R_0^3 c_l]}};$$

$$a_l = j_l^2(k_1 R_0) - j_{l+1}(k_1 R_0) j_{l-1}(k_1 R_0);$$

$$b_l = j_l^2(k_2 (R_0 + L)) - j_{l+1}(k_2 (R_0 + L)) j_{l-1}(k_2 (R_0 + L));$$

$$c_l = j_l^2(k_2 R_0) - j_{l+1}(k_2 R_0) j_{l-1}(k_2 R_0).$$

Условие разрешимости уравнений (3) и (4)

$$m_2 \frac{dj_l(k_1 r)}{dr} \Big|_{r=R_0} = m_1 \frac{j_l(k_1 R_0)}{j_l(k_2 R_0)} \frac{dj_l(k_2 r)}{dr} \Big|_{r=R_0} \quad (5)$$

определяет энергетический спектр электронов с энергией  $E^{(1)}$  меньше  $U_0$ .

Проанализируем эволюцию квазистационарных состояний в рамках изложенной выше модели. На рис.2 представлены результаты численного анализа (5) применительно к электронам с  $E^{(1)} < U_0$  в КТ «ядро/оболочка» типа I на основе CdSe/ZnS [14] (эффективная масса электрона  $m_{\text{CdSe}} = 0.13m_0$ ,  $m_{\text{ZnS}} = 0.28m_0$ , где  $m_0$  – масса свободного электрона;  $U_0 = 0.70$  эВ;  $l = 1$ ).

Анализ показывает, что число дискретных уровней с  $E^{(1)} < U_0$  конечно, и более того, дискретные уровни появляются только в том случае, когда радиус квантовой точки превышает некоторое минимальное значение  $R_{\text{min}}$ . При фиксированном значении углового момента  $l$  уравнение (5) может иметь несколько решений, соответствующих дискретным уровням энергии с главным квантовым числом  $n$ .

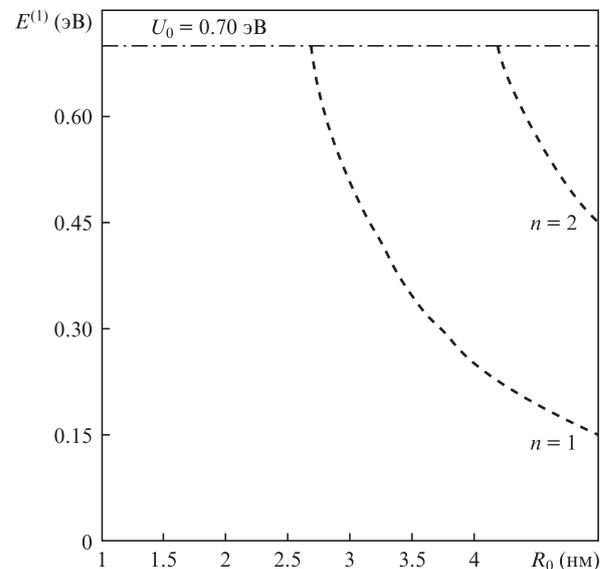


Рис.2. Энергетический спектр электронов ( $E^{(1)} < U_0$ ) как функция радиуса ядра квантовой точки «ядро/оболочка» типа I.

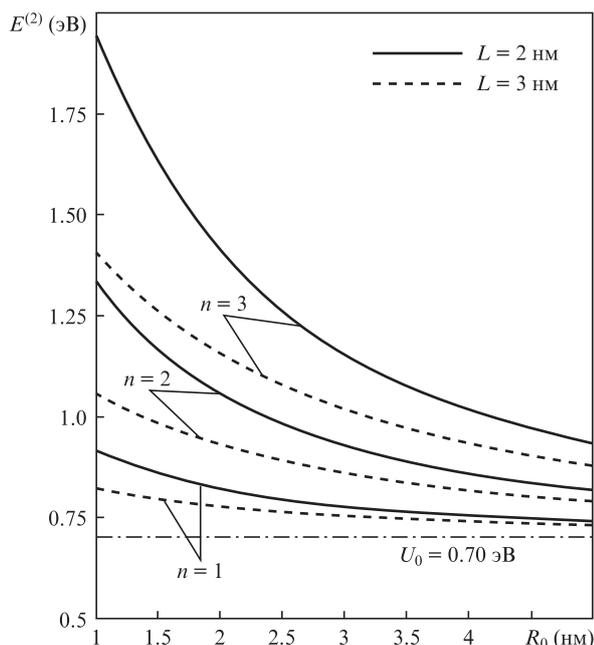


Рис.3. Энергетический спектр электронов ( $E^{(2)} > U_0$ ) как функция радиуса ядра квантовой точки «ядро/оболочка» типа I.

Условие равенства волновой функции нулю на границе КТ

$$R_l^{(i)}(R_0 + L) = 0$$

определяет энергетический спектр электронов с энергией  $E^{(2)} > U_0$ :

$$E^{(2)} = \frac{\hbar^2 \xi_{nl}^2}{2m_2^*(R_0 + L)^2} + U_0, \quad (6)$$

где  $\xi$  –  $n$ -й корень функции Бесселя порядка  $l$ .

На рис.3 представлены результаты численного анализа (6) применительно к электронам с  $E^{(2)} > U_0$  в КТ «ядро/оболочка» типа I на основе CdSe/ZnS ( $l=1$ ). Анализ показывает, что с уменьшением радиуса ядра при фиксированной толщине оболочки  $L$  энергия электронов существенно возрастает вследствие квантоворазмерного эффекта. Как видно из рис.3, увеличение толщины оболочки от 2 до 3 нм приводит к уменьшению энергии носителей заряда. Кроме того, поскольку энергия электронов в КТ не зависит от магнитного квантового числа  $m$ , все состояния с  $l \neq 0$  вырождены по энергии с кратностью  $2l + 1$ .

На рис.4 представлен обобщенный энергетический спектр электронов в квантовой точке «ядро/оболочка» типа I на основе CdSe/ZnS ( $l=1$ ). Анализ показывает, что при определенных размерах радиуса ядра квантовой точки наблюдается скачок в энергии электронов, что возможно связано с проявлением дополнительного квантового ограничения носителей заряда оболочкой КТ. Из рисунка видно, что при увеличении размера ядра квантовой точки энергетические уровни сближаются и при  $R_0 > 10$  нм квантоворазмерные эффекты при комнатной температуре становятся ненаблюдаемыми. Кроме того, наличие дискретных энергетических уровней  $E^{(1)} < U_0$  возможно приведет к проявлению ап-конверсии фотонов. Данный эффект может наблюдаться в виде флуоресценции при возбужде-

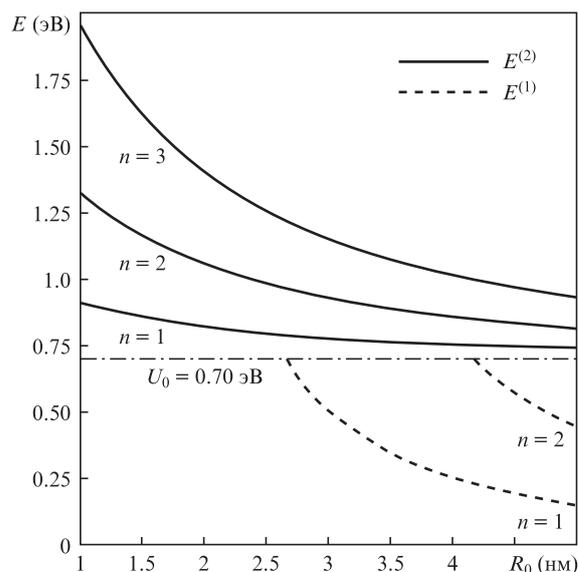


Рис.4. Энергетический спектр электронов как функция радиуса ядра квантовой точки «ядро/оболочка» типа I.

нии квантовой точки лазерным излучением с энергией меньше ширины запрещенной зоны материала оболочки [15].

Таким образом, рассматриваемая модель обеспечивает решение задачи о нахождении спектра и волновых функций электрона в квантовой точке «ядро/оболочка» типа I. Полученные результаты могут использоваться для получения КТ с заданными электрофизическими и оптическими свойствами для устройств опто- и наноэлектроники нового поколения.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант №12-02-97040).

1. Ораевский А.Н., Скалли М., Величанский В.Л. *Квантовая электроника*, **25** (3), 211 (1998).
2. Андреева Е.В., Лапин П.И., Прохоров В.В., Якубович С.Д. *Квантовая электроника*, **37** (4), 331 (2007).
3. Шурпо Н.А., Тимонни Д.В., Каманина Н.В. *Наносистемы: физика, химия, математика*, **3** (2), 85 (2012).
4. Екимов А.И., Онущенко А.А. *Письма в ЖЭТФ*, **34** (6), 363 (1981).
5. Черкашин Н.А., Максимов М.В., Макаров А.Г., Шукин В.А., Устинов В.М., Луковская Н.В., Мусихин Ю.Г., Цырлин Г.Э., Берт Н.А., Алферов Ж.И., Леденцов Н.Н., Бимберг Д. *ФТП*, **37** (7), 890 (2003).
6. Грунин А.Б., Евстифеев В.В., Игошина С.Е., Кривчик В.Д., Разумов А.В. *Известия высших учебных заведений. Естественные науки (Поволжский регион)*, №1, 103 (2007).
7. Игошина С.Е., Калинин Е.Н., Кривчик В.Д., Яшин С.В. *Известия высших учебных заведений. Естественные науки (Поволжский регион)*, №1, 109 (2007).
8. Wawendi M.G., Murray C.B., Norris D.J. *J. Am. Chem. Soc.*, **115**, 8706 (1993).
9. Baranov A.V., Rakovich Yu.P., Donegan J.F., Perova T.S., Moore R.A., Talapin D.V., Rogach A.L., Masumoto, Y., Nabiev I. *Phys. Rev.*, **68**, 165306 (2003).
10. Зегря Г.Г., Самосват Д.М. *ЖЭТФ*, **135** (6), 1043 (2009).
11. Ткач Н.В., Сети Ю.А. *ФТТ*, **51** (3), 979 (2009).
12. Бормонтов Е.Н., Клиньских А.Ф., Королев Н.В., Стародубцев С.Е. *Конденсированные среды и межфазные границы*, **13** (1), 67 (2011).
13. Олейников В.А., Суханова А.В., Набиев И.Р. *Рос. нанотехнологии*, **2** (1), 160 (2007).
14. Molnar M., Ning Z.-J., Chen Y., Friberg P., Gan L.-M., Fu Y. *Sensors and Actuators B: Chemical*, **155**, 823 (2011).
15. Auzel F.J. *Luminescence*, **45**, 341 (1990).