

# Энергия связи экситона в полупроводниковых квантовых точках

© С.И. Покутний<sup>¶</sup>

Институт металлофизики им. Г.В. Курдюмова Национальной академии наук Украины,  
03680 Киев, Украина

(Получена 10 июня 2009 г. Принята к печати 10 сентября 2009 г.)

В адиабатическом приближении, а также в рамках модифицированного метода эффективной массы, в котором приведенная эффективная масса экситона  $\mu = \mu(a)$  является функцией радиуса  $a$  полупроводниковой квантовой точки, получено выражение для энергии связи экситона  $E_{ex}(a)$  в квантовой точке. Обнаружен эффект существенного увеличения энергии связи экситона  $E_{ex}(a)$  в квантовых точках селенида и сульфида кадмия с радиусами  $a$ , сравнимыми с боровскими радиусами экситона  $a_{ex}$ , относительно энергии связи экситона в монокристаллах CdSe и CdS (в 7.4 и 4.5 раз соответственно).

## 1. Введение

В настоящее время особое внимание уделяется исследованиям полупроводниковых нанокристаллов сферической формы — так называемых квантовых точек (КТ) с радиусами  $a = 1–10$  нм, содержащих в своем объеме сульфид и селенид кадмия, арсенид галлия, германий и кремний, синтезированных в матрице боросиликатного стекла [1–4]. Последнее обстоятельство связано с их уникальными фотолюминесцентными свойствами, способностью эффективно излучать свет в видимом или близком инфракрасном диапазонах при комнатной температуре [1–6].

В большинстве теоретических моделей, в которых рассчитывались энергетические спектры квазичастиц в КТ, авторами использовалось приближение эффективной массы, которому приписывалась применимость к КТ по аналогии с массивными монокристаллами [6–9]. Вопрос о применимости приближения эффективной массы к описанию полупроводниковых КТ является до сих пор нерешенным [6,9,10].

В работе [10] предложен новый модифицированный метод эффективной массы, с помощью которого описывался энергетический спектр экситона в полупроводниковых КТ с радиусами  $a$ , сравнимыми с боровским радиусом экситона  $a_{ex}$  ( $a_{ex}$  — боровский радиус экситона в полупроводниковом материале, который содержится в объеме КТ). Показано, что в рамках модели КТ, в которой КТ описывалась бесконечно глубокой потенциальной ямой, приближение эффективной массы можно применять к описанию экситона в КТ с радиусами  $a \approx a_{ex}$ , считая, что приведенная эффективная масса экситона является функцией радиуса  $a$  КТ:  $\mu = \mu(a)$ .

Применению полупроводниковых наносистем в качестве активной области инжекционных нанолазеров препятствует малая энергия связи экситона  $E_{ex}(a)$  в КТ, а также распад экситонов при комнатной температуре для большинства полупроводниковых КТ [1,2,6,7]. Поэтому исследования, направленные на поиск наноструктур, в которых может наблюдаться существенное увеличение энергии связи экситона  $E_{ex}(a)$  в КТ, являются весьма актуальными.

В настоящей работе в адиабатическом приближении, а также в рамках модифицированного метода эффективной массы теоретически обнаружен эффект существенного увеличения энергии связи экситона  $E_{ex}(a)$  в КТ селенида и сульфида кадмия с радиусами  $a \approx a_{ex}$  (в 7.4 и 4.5 раз соответственно) по сравнению с энергией связи экситона в монокристаллах CdSe и CdS. Обсуждаются также возможности использования в качестве активной области полупроводниковых лазеров наносистем, состоящих из КТ сульфида и селенида кадмия, синтезированных в матрице боросиликатного стекла.

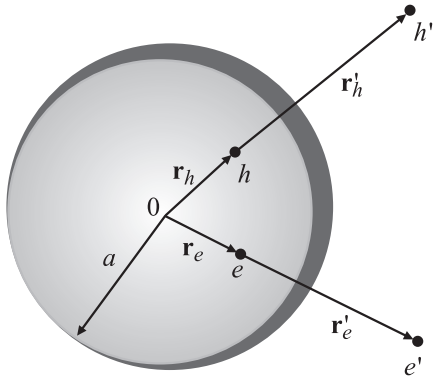
## 2. Энергия связи экситона в квантовых точках в адиабатическом приближении

Рассмотрим простую модель квазинульмерной системы: нейтральную полупроводниковую сферическую КТ радиуса  $a$ , которая содержит в своем объеме полупроводниковый материал с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon_2$ , окруженную матрицей с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon_1$ . При этом диэлектрическая проницаемость КТ  $\epsilon_2$  существенно больше диэлектрической проницаемости матрицы  $\epsilon_1$  (т.е. относительная диэлектрическая проницаемость  $\epsilon = (\epsilon_2/\epsilon_1) \gg 1$ ). В объеме такой КТ движутся электрон  $e$  и дырка  $h$  с эффективными массами  $m_e$  и  $m_h$  ( $r_e$  и  $r_h$  — расстояния до электрона и дырки от центра КТ, см. рис. 1) [7–10]. Предполагается, что зоны электронов и дырок имели параболическую форму. Характерными размерами задачи являются величины  $a$ ,  $a_e$ ,  $a_h$ ,  $a_{ex}$ , где

$$a_e = \frac{\epsilon_2 \hbar^2}{m_e e^2}, \quad a_h = \frac{\epsilon_2 \hbar^2}{m_h e^2}, \quad a_{ex} = \frac{\epsilon_2 \hbar^2}{\mu_0 e^2} \quad (1)$$

— боровские радиусы электрона, дырки и экситона соответственно в полупроводнике с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon_2$ ,  $e$  — заряд электрона,  $\mu_0 = m_e m_h / (m_e + m_h)$  — приведенная эффективная масса экситона в полупроводнике с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon_2$ . То обстоятельство, что все характерные размеры задачи  $a$ ,  $a_e$ ,  $a_h$ ,  $a_{ex}$  значительно больше межатомных расстояний  $a_0$ , позволяет рассматривать

<sup>¶</sup> E-mail: Pokutnyi\_Sergey@inbox.ru



**Рис. 1.** Схематическое изображение экситона в сферической квантовой точке. Радиус-векторы  $r_e$  и  $r_h$  определяют расстояние электрона  $e$  и дырки  $h$  от центра КТ с радиусом  $a$ . Заряды изображений  $e' = (a/r_e)e$  и  $h' = (a/r_h)h$  расположены на расстояниях  $r'_e = (a^2/r_e)$  и  $r'_h = (a^2/r_h)$  от центра КТ и представляют собой точечные заряды изображения электрона и дырки соответственно.

движение электрона и дырки в КТ в приближении эффективной массы.

Энергию поляризационного взаимодействия  $U(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a)$  электрона и дырки со сферической поверхностью раздела „КТ — диэлектрическая матрица“ при относительной диэлектрической проницаемости  $\varepsilon \gg 1$  можно представить в виде алгебраической суммы энергий взаимодействия дырки и электрона со своими,  $V_{hh'}(r_h, a)$ ,  $V_{ee'}(r_e, a)$  (энергия „самодействия“), и с „чужими“,  $V_{eh'}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a)$ ,  $V_{eh}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a)$ , изображениями соответственно [7–9] (рис. 1):

$$U(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a) = V_{hh'}(r_h, a) + V_{ee'}(r_e, a) + V_{eh'}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a) + V_{eh}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a), \quad (2)$$

где

$$V_{hh'}(r_h, a) = \frac{e^2}{2\varepsilon_2 a} \left( \frac{a^2}{a^2 - r_h^2} + \varepsilon \right), \quad (3)$$

$$V_{ee'}(r_e, a) = \frac{e^2}{2\varepsilon_2 a} \left( \frac{a^2}{a^2 - r_e^2} + \varepsilon \right), \quad (4)$$

$$V_{eh'}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a) = V_{eh}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a) = -\frac{e^2 \beta}{2\varepsilon_2 a} \frac{a}{[(r_e r_h / a)^2 - 2r_e r_h \cos \theta + a^2]^{1/2}}. \quad (5)$$

В формуле (5) параметр

$$\beta = \frac{(\varepsilon - 1)}{(\varepsilon + 1)}, \quad (6)$$

а угол  $\theta = \mathbf{r}_e \wedge \mathbf{r}_h$ .

В изучаемой модели квазиульмерной структуры (рис. 1) в рамках вышеизложенных приближений, а

также в приближении эффективной массы гамильтониан экситона, движущегося в объеме КТ, принимает вид [7–9]

$$H(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a) = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_e - \frac{\hbar^2}{2m_h} \Delta_h + E_g + U(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a) + V_{eh}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) + V_e(r_e, a) + V_h(r_h, a), \quad (7)$$

где первые два члена являются операторами кинетической энергии электрона и дырки,  $E_g$  — ширина запрещенной зоны в неограниченном полупроводнике с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_2$ ; энергия кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой  $V_{eh}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$  описывается формулой

$$V_{eh}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = -\frac{e^2}{\varepsilon_2 |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|}. \quad (8)$$

В гамильтониане экситона (7) потенциалы

$$V_e(r_e, a), V_h(r_h, a) = \begin{cases} 0, & r_e, r_h \leq a \\ \infty, & r_e, r_h > a \end{cases} \quad (9)$$

описывают движение квазичастиц в объеме КТ с помощью модели бесконечно глубокой потенциальной ямы.

При выполнении условия

$$a_h \ll a \ll a_e \approx a_{ex} \quad (10)$$

можно использовать адиабатическое приближение (в котором эффективная масса дырки  $m_h$  значительно превосходит эффективную массу электрона  $m_e$ ), считая кинетическую энергию электрона в КТ

$$T_{n_e, l_e=0}^e(S) = \frac{\pi^2 n_e^2}{S^2} \left( \frac{\mu_0}{m_e} \right) \text{Ry}_{ex}$$

самой большой величиной задачи ( $S = (a/a_{ex})$  — безразмерный радиус КТ) [7–9]. Используя первый порядок теории возмущений, получим энергию связи экситона  $E_{ex}^{n_e, l_e; n_h, l_h}(a, \varepsilon)$  в основном состоянии ( $n_e = 1, l_e = 0; n_h = 1, l_h = 0$ ) ( $n_e, l_e$  и  $n_h, l_h$  — главные и орбитальные квантовые числа электрона и дырки) в КТ радиуса  $a$  (10):

$$E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon) = \bar{V}_{eh}^{1,0;1,0}(a) + [\bar{V}_{eh'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon) + \bar{V}_{he'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)]. \quad (11)$$

Средние значения энергии кулоновского взаимодействия электрона с дыркой  $\bar{V}_{eh}^{1,0;1,0}(a)$ , а также энергий взаимодействия электрона и дырки с „чужими“ изображениями  $\bar{V}_{eh'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon) + \bar{V}_{he'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$ , полученные усреднением энергий (8) и (5) на электронных волновых функциях потенциальной ямы бесконечной глубины КТ, принимают такой вид:

$$\bar{V}_{eh}^{1,0;1,0}(S) = -\left\{ \frac{2}{S} [\ln(2\pi) + \gamma - \text{Ci}(2\pi)] - \omega(S, n_e = 1) \frac{3}{2} \right\} \text{Ry}_{ex}, \quad (12)$$

$$\omega(S, n_e = 1) = \frac{2[1 + (2/3)\pi^2]^{1/2}}{S^{3/2}} \left(\frac{\mu_0}{m_h}\right)^{1/2}, \quad (13)$$

$$[\bar{V}_{eh}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon) + \bar{V}_{he'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)] = -\frac{2\beta}{S} Ry_{ex}, \quad (14)$$

где энергия связи экситона

$$E_{ex} = Ry_{ex} = \frac{(\mu_0/m_0)}{\varepsilon_2^2} Ry_0 \quad (15)$$

в неограниченном полупроводнике с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_2$  (Ci(y) — интегральный косинус,  $\gamma = 0.577$  — постоянная Эйлера,  $Ry_0 = 13.61$  эВ — постоянная Ридберга).

Эффект усиления энергии связи экситона  $E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (11) в КТ, согласно формулам (11)–(15), определяется двумя факторами: перенормировкой энергии кулоновского взаимодействия электрона с дыркой  $\bar{V}_{eh}^{1,0;1,0}(a)$  (12), связанной с чисто пространственным ограничением области квантования объемом КТ, а также энергией взаимодействия электрона и дырки с „чужими“ изображениями  $\bar{V}_{eh}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon) + \bar{V}_{he'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (14) (эффект „диэлектрического усиления“ [11]), возникающими на сферической поверхности раздела КТ–диэлектрическая матрица (рис. 1).

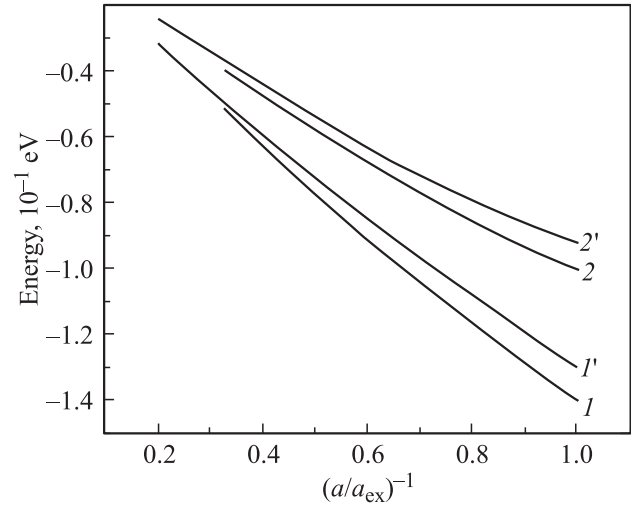
Эффект „диэлектрического усиления“ обусловлен тем, что в случае, когда диэлектрическая проницаемость матрицы  $\varepsilon_1$  значительно меньше, чем диэлектрическая проницаемость КТ  $\varepsilon_2$ , существенную роль во взаимодействии между электроном и дыркой в объеме КТ играет поле, создаваемое этими квазичастицами в матрице. При этом взаимодействие между электроном и дыркой в КТ оказывается значительно больше, чем в неограниченном полупроводнике с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_2$  [11].

Экспериментальная зависимость положения экситонных линий поглощения КТ сульфида кадмия радиусом  $a \leq 30$  нм, диспергированных в прозрачной диэлектрической матрице боросиликатного стекла, которые вызваны межзонными переходами дырки на уровни размерного квантования электрона ( $n_e = 1$ ,  $l_e \leq 2$ ) в зоне проводимости, от радиуса КТ  $a$  была получена в [3]. При этом законы дисперсии носителей заряда у дна зоны проводимости и валентной зоны в хорошем приближении можно считать параболическими.

Следует отметить, что в рамках развитой нами теории можно, строго говоря, получить значения энергии связи экситона  $E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (11) в КТ сульфида и селенида кадмия лишь с радиусами [12]

$$a_{ex} \leq a \leq 3a_{ex}. \quad (16)$$

Для КТ сульфида кадмия с радиусами  $a$  (16), выращенных в матрице боросиликатного стекла [3], наибольшая энергия связи экситона  $|E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)| \approx 4.50 Ry_{ex} \approx 1.4 \cdot 10^{-1}$  эВ наблюдается в КТ радиусом  $a = a_{ex} = 2.5$  нм (рис. 2). Такое значение энергии связи



**Рис. 2.** Зависимость энергии связи экситона  $E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (11) (1),  $\bar{E}_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (21) (1') и энергии кулоновского взаимодействия  $\bar{V}_{eh}^{1,0;1,0}(a)$  (12) (2),  $\bar{V}_{eh}^{1,0;1,0}(a)$  (22) (2') в КТ сульфида кадмия от радиуса  $a$  КТ.  $a_{ex} = 2.5$  нм — боровский радиус экситона в монокристалле CdS.

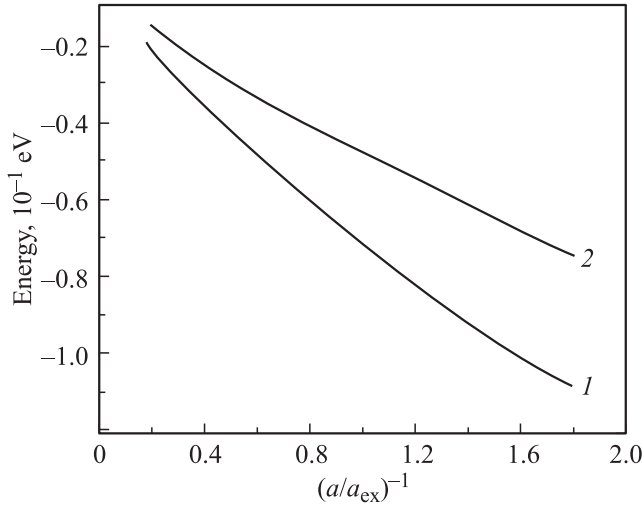
экситона в КТ существенно превышает (в 4.5 раз) энергию связи экситона  $E_{ex} \approx 31$  мэВ (15) в монокристалле CdS. Соответственно в КТ сульфида кадмия с радиусами  $a = 5, 7.5$  нм, т. е.  $a = (2, 3)a_{ex}$ , энергия связи экситона  $|E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)|$  (11) принимает весьма существенные значения:  $|E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)| \approx (2.5, 1.73) Ry_{ex} \approx (77, 54)$  мэВ (рис. 2).

Основной вклад в энергию связи экситона  $E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (11)–(14) в КТ сульфида кадмия с радиусами  $a$  (16) (т. е.  $2.5 \leq a \leq 7.5$  нм) вносит среднее значение энергии кулоновского взаимодействия  $\bar{V}_{eh}^{1,0;1,0}(a)$  (12) между электроном и дыркой:  $0.714 \leq |\bar{V}_{eh}^{1,0;1,0}(a)/E_{ex}^{1,0;1,0}(a)| \leq 0.74$ . При этом среднее значение энергии взаимодействия электрона и дырки с „чужими“ изображениями  $\bar{V}_{eh}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon) + \bar{V}_{he'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (14) дает в энергию связи экситона  $E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (11) в КТ меньший, но существенный вклад:  $0.26 \leq |[\bar{V}_{eh}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon) + \bar{V}_{he'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)]/E_{ex}^{1,0;1,0}(a)| \leq 0.286$  (рис. 2).

В интервале радиусов

$$0.55a_{ex} \leq a \leq 2.76a_{ex} \quad (17)$$

КТ селенида кадмия, выращенных в матрице боросиликатного стекла [4], энергия связи экситона принимает наибольшее значение  $|E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)| \approx 7.4 Ry_{ex} \approx 1.1 \cdot 10^{-1}$  эВ в КТ радиусом  $a = 0.55a_{ex} = 2.5$  нм (рис. 3). Такое значение энергии связи экситона существенно превышает (в 7.4 раза) энергию связи экситона  $E_{ex} \approx 15$  мэВ (15) в монокристалле CdSe. Соответственно в КТ селенида кадмия с радиусами  $a = 5, 7.5, 10, 12.5$  нм (т. е.  $a = (1.1, 1.66, 2.21, 2.76)a_{ex}$ ) энергия связи экситона (11) принимает существенные



**Рис. 3.** Зависимость энергии связи экситона  $E_{\text{ex}}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (11) (1) и энергии кулоновского взаимодействия  $\bar{V}_{eh}^{1,0;1,0}(a)$  (12) (2) в КТ селенида кадмия от радиуса  $a$  КТ.  $a_{\text{ex}} = 4.55$  нм — боровский радиус экситона в монокристалле CdSe.

значения:  $|E_{\text{ex}}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)| \approx 4.26, 3.0, 2.0, 1.76 \text{ Ry}_{\text{ex}} \approx 64, 45, 30, 27 \text{ мЭВ}$  (рис. 3).

Основной вклад в энергию связи экситона (11) в КТ селенида кадмия с радиусами  $a$  (17) (т.е.  $2.5 \leq a \leq 12.5$  нм) дает среднее значение энергии кулоновского взаимодействия  $\bar{V}_{eh}^{1,0;1,0}(a)$  (12) между электроном и дыркой,  $0.74 \leq |\bar{V}_{eh}^{1,0;1,0}(a)/E_{\text{ex}}^{1,0;1,0}(a)| \leq 0.80$ , тогда как среднее значение энергий взаимодействия электрона и дырки с „чужими“ изображениями,  $\bar{V}_{eh'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon) + \bar{V}_{he'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (14), вносит в энергию связи экситона  $E_{\text{ex}}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (11) в КТ меньший, но заметный вклад:  $0.20 \leq [|\bar{V}_{eh'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon) + \bar{V}_{he'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)|/|E_{\text{ex}}^{1,0;1,0}(a)|] \leq 0.26$  (см. рис. 3).

Эффект „диэлектрического усиления“ [11] энергии связи экситона  $|E_{\text{ex}}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)|$  (11) в КТ, согласно формуле (14), определяется отношением  $|\bar{V}_{eh'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon) + \bar{V}_{he'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)|/\text{Ry}_{\text{ex}} = 2\beta/S$ , которое зависит от значения параметра  $\beta$  (6) (для КТ CdS параметр  $\beta = 0.63$ , а для КТ CdSe параметр  $\beta = 0.67$ ).

### 3. Энергия связи экситона в квантовых точках в рамках модифицированного метода эффективной массы

В работе [10] в рамках модифицированного метода эффективной массы использовалась радиальная вариационная волновая функция основного состояния экситона ( $1s$ -состояния электрона и  $1s$ -состояния дырки) в КТ

сульфида кадмия радиуса  $a$ :

$$\Psi_0(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, r) = A \exp\left[-\frac{\mu(a)}{\mu_0} \frac{r}{a_{\text{ex}}}\right] \frac{\sin(\pi r_e/a)}{r_e} \frac{\sin(\pi r_h/a)}{r_h} \times \frac{(a^2 - r_e^2)}{a^2} \frac{(a^2 - r_h^2)}{a^2} \frac{r}{a} \frac{|\mathbf{r}_e - (a/r_h)^2 \mathbf{r}_h|}{a}, \quad (18)$$

где  $r = |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|$ . В волновой функции экситона (18) приведенная эффективная масса экситона  $\mu(a)$  является вариационным параметром. В работе [10] показано (см. таблицу), что функция  $\mu(a)$  монотонно слабо меняется в пределах

$$0.40 \leq [\mu(a)/m_0] \leq (\mu_0/m_0) = 0.197 \quad (19)$$

при изменении радиуса  $a$  КТ в интервале

$$2.5 \leq a \leq 8.5 \text{ нм} \quad (20)$$

( $\mu_0$  — приведенная эффективная масса экситона в монокристалле сульфида кадмия,  $m_0$  — масса свободного электрона). Значения функции  $\mu(a)$  (19) в КТ CdS, радиус которой определялся неравенством (20), были получены в [10] в условиях экспериментов [3].

По аналогии с формулой (11) запишем выражение для энергии связи экситона  $\tilde{E}_{\text{ex}}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  в основном состоянии ( $n_e = 1, l_e = 0; n_h = 1, l_h = 0$ ) в КТ сульфида кадмия радиуса  $a$  (20):

$$\tilde{E}_{\text{ex}}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon) = \tilde{V}_{eh}^{1,0;1,0}(a) + [\tilde{V}_{eh'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon) + \tilde{V}_{he'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)]. \quad (21)$$

Средние значения энергии кулоновского взаимодействия электрона с дыркой,  $\tilde{V}_{eh}^{1,0;1,0}(a)$ , а также энергий взаимодействия электрона и дырки с „чужими“ изображениями,  $\tilde{V}_{eh'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon) + \tilde{V}_{he'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$ , полученные усреднением энергии (8) и (5) на вариационных волновых функциях экситона  $\Psi_0(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, r)$  (18), принимают такой вид:

$$\tilde{V}_{eh}^{1,0;1,0}(a) = \langle \Psi_0(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, r) | V_{eh}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) | \Psi_0(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, r) \rangle, \quad (22)$$

$$\tilde{V}_{eh'}^{1,0;1,0}(a) + \tilde{V}_{he'}^{1,0;1,0}(a) = \langle \Psi_0(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, r) | V_{eh'}^{1,0;1,0}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a) + V_{he'}^{1,0;1,0}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a) | \Psi_0(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, r) \rangle. \quad (23)$$

Подставляя значения функции  $\mu(a)$  (19), взятые из таблицы, одновременно с соответствующими значениями радиуса  $a$  КТ сульфида кадмия из интервала (20) в выражения (22) и (23), получим значения энергий  $\tilde{V}_{eh}^{1,0;1,0}(a)$  (22) и  $\tilde{V}_{eh'}^{1,0;1,0}(a) + \tilde{V}_{he'}^{1,0;1,0}(a)$  (23), а также значение энергии связи

Значение вариационного параметра  $\mu(a)$  как функции радиуса  $a$  нанокристалла сульфида кадмия [10]

$a$ , нм	2.5	3.0	4.0	5.0	6.0	7.0	8.0	8.5
$\mu(a)/m_0$	0.40	0.37	0.32	0.28	0.23	0.21	0.20	0.197

экситона  $\tilde{E}_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (21) как функций радиуса  $a$  КТ сульфида кадмия (рис. 2). При этом величина энергии связи экситона  $|E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)| = 4.19 \text{ Ry}_{ex} \approx 1.30 \cdot 10^{-1} \text{ эВ}$  в КТ CdS радиусом  $a = a_{ex}$ , выращенной в матрице боросиликатного стекла в условиях экспериментов [3] (см. рис. 2), в 1.07 раз меньше соответствующего значения энергии связи экситона  $|E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)|$  (11) в КТ CdS того же радиуса  $a = a_{ex}$ , полученного с использованием адиабатического приближения. В КТ сульфида кадмия с радиусами  $a = 5, 7.5, 10, 12.5, 13.5 \text{ нм}$  (т.е.  $a = (2, 3, 4, 5, 5.4)a_{ex}$ ) энергия связи экситона (21) принимает значения  $|\tilde{E}_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)| \approx 2.29, 1.65, 1.20, 1.06, 1.0 \text{ Ry}_{ex} = 71.1, 51, 37.1, 33.0, 31 \text{ мэВ}$ , которые слабо отличаются от соответствующих значений  $|E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)|$  (11) — на величину  $\Delta = |(\tilde{E}_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon) - E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon))/E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)|$ , меняющуюся в пределах от 7 до 5% при изменении радиусов  $a$  КТ в интервале (16) (рис. 2). При этом энергия связи экситона  $|\tilde{E}_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)|$  (21) в КТ сульфида кадмия радиусом  $a_c = 5.4a_{ex} \approx 13.5 \text{ нм}$  принимает значение, равное энергии связи экситона  $E_{ex} = 31 \text{ мэВ}$  (15) в монокристалле CdS.

Так же как и для значений энергии связи экситона  $E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (11) в КТ CdS, полученных в рамках адиабатического приближения, основной вклад в энергию связи экситона  $\tilde{E}_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (21)–(23) в КТ сульфида кадмия с радиусами  $a \geq a_{ex}$  вносит среднее значение энергии кулоновского взаимодействия  $\tilde{V}_{eh}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (22) между электроном и дыркой  $0.70 \leq |\tilde{V}_{eh}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)/\tilde{E}_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)| \leq 0.78$ . При этом среднее значение энергии взаимодействия электрона и дырки с „чужими“ изображениями,  $\tilde{V}_{eh'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon) + \tilde{V}_{he'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (23), дает энергию связи экситона (21) в КТ меньший, но заметный вклад:  $0.22 \leq |[\tilde{V}_{eh'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon) + \tilde{V}_{he'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)]/\tilde{E}_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)| \leq 0.30$  (рис. 2).

Следует отметить, что значения энергии связи экситона  $|\tilde{E}_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)|$  (21) в КТ сульфида кадмия радиусами  $a \geq a_{ex}$ , полученные вариационным методом, являются несколько завышенными (параметр  $\Delta$  слабо меняется в пределах от 5 до 7%) по сравнению с соответствующими значениями энергии связи экситона  $|E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)|$  (11) в КТ CdS радиусом  $a$  (16), вычисленными в рамках адиабатического приближения [8,9,12]. Такое различие значений энергии связи экситона в КТ CdS  $|\tilde{E}_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)|$  (21) и  $|E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)|$  (11), по-видимому, обусловлено тем обстоятельством, что вариационные методы расчета энергетического спектра экситона в КТ [10,13,14] дают завышенные значения, что в свою очередь приводит так же к завышенному значению энергии связи экситона (21) в КТ.

Таким образом, в отличие от энергии связи экситона  $E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (11), полученной в рамках адиабатического приближения, только в интервале радиусов  $a$  КТ CdS, ограниченного сверху неравенством (16), вариационный модифицированный метод эффективной массы [10] да-

ет возможность получить выражение  $\tilde{E}_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (21), описывающее энергию связи экситона в КТ CdS в области радиусов  $a \geq a_{ex}$ , которая не ограничена сверху. При этом выражение  $\tilde{E}_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (21) позволило проследить предельный переход к величине энергии связи экситона  $E_{ex} = 31 \text{ мэВ}$  (15) в монокристалле CdS начиная с радиуса КТ сульфида кадмия  $a \geq a_c \approx 5.4a_{ex} \approx 13.5 \text{ нм}$ .

## 4. Заключение

Для применения полупроводниковых наносистем, содержащих КТ селенида и сульфида кадмия, в качестве активной области инжекционных лазеров необходимо, чтобы энергия связи экситона  $E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (11),  $\tilde{E}_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (21) в КТ была порядка нескольких  $kT_0$  при комнатной температуре  $T_0$  ( $k$  — постоянная Больцмана), т.е. параметры  $E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)/kT_0$ ,  $\tilde{E}_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)/kT_0$  должны быть много больше единицы. Это дает возможность устранить основную проблему наноэлектроники — „размывание“ уровней квазичастиц в энергетическом интервале  $\sim kT_0$ , которое приводит к деградации оптических свойств лазеров на квантовых точках при повышении рабочей температуры [1,2,7].

В качестве активной области полупроводниковых лазеров на квантовых точках можно использовать наносистемы, состоящие из КТ сульфида и селенида кадмия, выращенных в матрице боросиликатного стекла [3,4]. Для КТ CdS радиусами  $a = 2.5, 5 \text{ нм}$  параметры  $E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)/kT_0$  и  $\tilde{E}_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)/kT_0$  принимают существенные значения, равные 5.4 и 3, 5.1 и 2.8 соответственно. Для КТ селенида кадмия с теми же радиусами  $a$  параметр  $E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)/kT_0$  характеризуется несколько меньшими значениями, равными 4.3 и 2.5.

В настоящей работе показано, что эффект увеличения энергии связи экситона  $E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (11),  $\tilde{E}_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (21) в КТ определяется двумя факторами: перенормировкой энергии кулоновского взаимодействия электрона с дыркой,  $\tilde{V}_{eh}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (12),  $\tilde{V}_{eh}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (22), связанной с чисто пространственным ограничением области квантования объемом КТ, а также энергией взаимодействия электрона и дырки с „чужими“ изображениями,  $\tilde{V}_{eh'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon) + \tilde{V}_{he'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (14),  $\tilde{V}_{eh'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon) + \tilde{V}_{he'}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (23) (эффект „диэлектрического усиления“ [11]). Обнаружен эффект существенного увеличения энергии связи экситона  $E_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (11),  $\tilde{E}_{ex}^{1,0;1,0}(a, \varepsilon)$  (21) в КТ селенида и сульфида кадмия с радиусами  $a \geq a_{ex}$  (в 7.4 и 4.5 раз соответственно) по сравнению с энергией связи экситона в монокристаллах CdSe и CdS.

## Список литературы

- [1] Ж.И. Алфёров. ФТП, **32** (1), 3 (1998).
- [2] Ж.И. Алфёров. УФН, **172** (9), 1068 (2002).
- [3] A. Ekimov, F. Nache. J. Opt. Soc. Amer. B, **20** (1), 100 (2003).

- [4] Ю.В. Вандышев, В.С. Днепровский, В.И. Климов. Письма ЖЭТФ, **53** (6), 301 (1991).
- [5] П.К. Кашкаров, М.Г. Лисаченко, О.А. Шальгина. ЖЭТФ, **124** (4), 1255 (2003).
- [6] И.М. Купчак, Д.В. Корбутяк, Ю.В. Крюченко. ФТП, **40** (1), 98 (2006).
- [7] S.I. Pokutnyi. Phys. Lett. A, **342**, 347 (2005).
- [8] S.I. Pokutnyi. Phys. Lett. A, **168** (5,6), 433 (1992).
- [9] С.И. Покутний. ФТП, **39** (9), 1101 (2005).
- [10] С.И. Покутний. ФТП, **41** (11), 1323 (2007).
- [11] Л.В. Келдыш. Письма ЖЭТФ, **29** (11), 776 (1979).
- [12] С.И. Покутний. ФТП, **30** (11), 1952 (1996).
- [13] А.Б. Мигдал. *Качественные методы в квантовой теории* (М., Наука, 1975).
- [14] С.И. Покутний. ФТТ, **38** (9), 2667 (1996).

*Редактор Л.В. Шаронова*

## The exciton binding energy in semiconductor quantum dots

*S.I. Pokutnii*

G.V. Kurdjumov Institute for Metal Physics,  
National Academy of Sciences of Ukraine,  
03680 Kiev, Ukraine

**Abstract** In the adiabatic approximation and also in the framework of the modified effective mass method in which the reduced exciton effective mass  $\mu = \mu(a)$  is a function of a semiconductor quantum dot radius  $a$ , the expression for the binding energy of the exciton  $E_{\text{ex}}(a)$  in a quantum dot is drawn. The effect of substantial amplification of the exciton binding energy  $E_{\text{ex}}(a)$  in quantum dots CdSe and CdS with radii  $a \approx a_{\text{ex}}$  (in 7.4 and 4.5 times correspondingly) is found out, in comparison with the exciton binding energy in monocrystals CdSe and CdS.