

УДК 621.315

## ОДНОЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОМ НАНОСФЕРИЧЕСКОМ СЛОЕ БОЛЬШОГО РАДИУСА

В.А. АРУТЮНЯН<sup>1</sup>, Д.Б. АЙРАПЕТАН<sup>1,2\*</sup>, Д.А. БАГДАСАРЯН<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Российско–Армянский (Славянский) университет, Ереван, Армения

<sup>2</sup>Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

\*e-mail: dhaugap82@gmail.com

(Поступила в редакцию 4 апреля 2016 г.)

В режиме сильного квантования рассмотрены одночастичные состояния в сферическом нанослое ядро/оболочка/оболочка. Соотношение между геометрическими размерами соответствующих компонент образца выбраны так, что различия между характеристиками материалов компонент структуры формируют в среднем слое композиции квантовую яму для носителей заряда. Предложены адекватные приближенные подходы, позволяющие в аналитическом виде определять энергетический спектр и волновые функции одноэлектронных состояний в сферическом нанослое. Проведено сравнение результатов аналитических и численных расчетов энергетического спектра носителей заряда в слое. Определен интервал значений отношения толщины слоя к его радиусу, при которых результаты предложенных приближений с достаточной точностью совпадают с результатами численных расчетов.

### 1. Введение

Быстрое развитие полупроводниковых технологий позволяет в настоящее время изготовление и получение квантовых наноструктур с различной геометрической конфигурацией и с различными физическими свойствами. В последние два десятилетия получены и интенсивно исследуются теоретически и экспериментально отдельные виды квантовых слоистых гетероструктур, так называемые квантовые точки–квантовые ямы (КТКЯ). В этих структурах обычно используются гетеропереходы на основе материалов  $A_2B_6$ ,  $A_4B_6$  и  $A_3B_5$  таких, как CdS/HgS/CdS, ZnS/CdS/ZnS, CdSe/HgSe/CdSe, CdTe/HgTe/CdTe, CdS/PbS/CdS, PbSe/CdS/PbSe, PbSe/CdSe/PbSe, AlAs/GaAs/AlAs/, InP/InAs/InP и др. [1–13]. Структура КТКЯ представляет собой наносистему, состоящую из квантовой точки (ядра), окруженной двумя или более оболочками чередующихся узкозонного и широкозонного материалов.

Особенностью КТКЯ является возможность контролировать физические свойства путем изменения радиуса ядра, толщины квантованного слоя и размера

внешней оболочки. Дополнительное манипулирование положением энергетических уровней и волновыми функциями носителей заряда в КТКЯ может быть достигнуто путем изменения состава и ширины квантовой ямы, окружающей квантовую точку (ядро). Такие гетерофазные наноструктуры привлекают к себе большое внимание из-за интересных физических свойств и возможных применений в электронике и оптоэлектронике [1–16]. Эти структуры также перспективны для использования в области современной медицины и биологии [17–20].

КТКЯ могут быть сформированы путем нанесения на предпочтительно сферическую квантовую точку (ядро) тонкого слоя другого полупроводника, который имеет меньшую ширину запрещенной зоны, а затем дополнительно покрыты толстым слоем (оболочкой) из материала ядра. Например, в CdS/HgS/CdS КТКЯ-структуре ядро из CdS (запрещенная зона ~2.5 эВ) окружено слоем узкозонного материала (запрещенная зона для  $\beta$ -HgS ~0.5 эВ), который затем покрывается более толстым слоем CdS (оболочка). Слой  $\beta$ -HgS является квантовой ямой как для электронов, так и для дырок, тогда как CdS-ядро и оболочка в такой композиции играют роль квантовых барьеров [1–3,21,22]. Таким образом, наряду с «всеобщим» размерным квантованием носителей заряда во всей наночастице в КТКЯ-структурах имеет место также дополнительное «локальное» размерное квантование движения носителей во внутренней квантовой яме образца.

Экспериментальные и теоретические исследования подобных систем показали, что после оптического возбуждения электроны и дырки в этих гетероструктурах локализованы в области квантовой ямы промежуточного слоя [6,10]. Другими примерами широко изучаемых КТКЯ-систем являются, например, структуры ZnS/CdS/ZnS [4,11] и CdTe/HgTe/CdTe [9], которые также обладают аналогичными свойствами. Очевидно, что определенный физический интерес представляет изучение состояний носителей заряда в области ямы при различных физических условиях в таких структурах.

## 2. Общий модельный подход

Рассмотрение наноструктуры ядро/оболочка/оболочка проведем на примере нанорадиального гетероперехода CdS/HgS/CdS [21,22]. Предположим, что для геометрических размеров системы имеют место следующие условия:

$$L \ll a_L, \quad (1)$$

$$L \ll R_1, \quad (2)$$

где  $L = R_2 - R_1$  – толщина слоя ( $R_1$  и  $R_2$  – соответственно внутренний и внешний радиусы слоя) и  $a_L$  – боровский радиус объемного экситона в материале слоя.

Условие (1) означает, что состояние носителей заряда в слое соответствует режиму сильного квантования, т. е. в данном случае энергией кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой в слое можно пренебречь по

сравнению с энергией размерного квантования носителей заряда. Условие (2) означает, что сам слой достаточно удален от центра системы. В плане технической реализуемости структуры ядро/оболочка/оболочка это условие является наиболее реалистичным. С физической точки зрения подобная структура представляет определенный интерес, т. к. в этом случае слой комбинирует в себе свойства как квантовой точки (КТ), так и квантовой пленки (КП), т. е. система уже не КТ, но еще не КП.

В табл.1 и 2 приведены соответственно физические характеристики и энергетические параметры кристаллов CdS и HgS при различных значениях  $L$  и  $R_1$ .

Табл.1. Характеристики кристаллов CdS и HgS [21,22]

Материал	$a$ , нм	$\epsilon_0$	$\mu_c/m_0$	$\mu_v/m_0$	$a_{ex}$ , нм	$E_g$ , эВ	$U^c$ , эВ	$U^v$ , эВ
CdS	0.5818	9.1	0.2	0.7	3	2.5	-3.8	-6.3
HgS	0.5851	18.2	0.036	0.044	50	0.5	-5.0	-5.5

Здесь  $\mu_c$  и  $\mu_v$  – эффективные массы носителей заряда,  $a$  – постоянная решетки,  $E_g$  – ширина запрещенной зоны объемного образца,  $U^c$  и  $U^v$  – соответственно дно зоны проводимости и потолок валентной зоны, отсчитываемые от уровня вакуума,  $\epsilon_0$  – статическая диэлектрическая проницаемость и  $a_{ex}$  – борровский радиус объемного экситона в данном материале.

Табл.2. Энергетические характеристики слоя HgS в гетероструктуре CdS/HgS/CdS [23,24]

$R_1$ , нм	$L$ , нм	$\Delta U^c$ , эВ	$\Delta U^v$ , эВ	$E_{rad}^c$ , мэВ	$E_{rot}^c$ , мэВ	$E_{rad}^v$ , мэВ	$E_{rot}^v$ , мэВ
15	5	1.2	-0.8	42.37	3.677	34.69	3.009
30	10	1.2	-0.8	10.59	0.9142	8.674	0.7482

Здесь  $\Delta U^c$  и  $\Delta U^v$  – энергетические разрывы для зоны проводимости и валентной зоны, соответственно,  $E_{rad}^{c,v}$  и  $E_{rot}^{c,v}$  представляют собой минимальные энергии соответственно радиального и вращательного движений носителей заряда в слое.

Из приведенных таблиц видно, что при выполнении условий (1) и (2) слой HgS в радиальном направлении можно аппроксимировать бесконечно глубокой потенциальной ямой [21,22]:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & R_1 < r < R_2 \\ \infty, & r \leq R_1, r \geq R_2. \end{cases} \quad (3)$$

В приближении изотропной эффективной массы  $\mu$  для носителя заряда в пределах слоя в сферических координатах имеем следующее уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \Psi(r, \theta, \varphi) - \frac{\hat{\mathbf{I}}^2}{r^2} \Psi(r, \theta, \varphi) \right] = E \Psi(r, \theta, \varphi). \quad (4)$$

Здесь  $E$  – полная энергия частицы,  $\Psi(r, \theta, \varphi)$  – ее полная волновая функция и  $\hat{\mathbf{I}}$  – оператор момента импульса ( $l = 0, 1, 2, \dots$ ). С учетом сферической симметрии системы волновую функцию  $\Psi(r, \theta, \varphi)$  будем искать в виде

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \Phi(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad (5)$$

где  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  – нормированные сферические гармоники [25] и  $m$  – азимутальное число ( $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$ ). Подставляя (5) в (4) для радиальной волновой функции  $\Phi(r)$  получим уравнение

$$\frac{1}{r^2} \left[ r^2 \frac{d\Phi(r)}{dr} \right] - \frac{l(l+1)}{r^2} \Phi(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2} E \Phi(r) = 0. \quad (6)$$

Сделаем подстановку

$$\Phi(r) = \frac{\chi(r)}{\sqrt{r}} \quad (7)$$

и перейдя к безразмерной переменной

$$x = kr, \quad (k^2 = 2\mu E / \hbar^2), \quad (8)$$

уравнение (6) можно свести к уравнению Бесселя

$$x^2 \frac{d^2 \chi(x)}{dx^2} + x \frac{d\chi(x)}{dx} + \left[ x^2 - \left( l + \frac{1}{2} \right)^2 \right] \chi(x) = 0. \quad (9)$$

В случае потенциала (3) решения уравнения (9) или (6) даются линейной комбинацией сферических функций Бесселя  $J_{l+1/2}(x)$  и функций Неймана  $N_{l+1/2}(x)$  [26]

$$\chi(x) = C_1 J_{l+1/2}(x) + C_2 N_{l+1/2}(x), \quad (10)$$

где  $C_1$  и  $C_2$  – постоянные нормировки. Соответствующие граничные условия для потенциальной ямы (3) запишутся в следующем виде:

$$\chi(kR_1) = \chi(kR_2) = 0, \quad (11)$$

$$\begin{cases} C_1 J_{l+1/2}(kR_1) + C_2 N_{l+1/2}(kR_1) = 0 \\ C_1 J_{l+1/2}(kR_2) + C_2 N_{l+1/2}(kR_1) = 0. \end{cases} \quad (12)$$

Из требования нетривиальности решений системы (12) приходим к общему условию определения энергетического спектра носителя заряда в слое при ограничивающем потенциале (3)

$$\frac{J_{l+1/2}[\pi b \varepsilon^{1/2}]}{N_{l+1/2}[\pi b \varepsilon^{1/2}]} = \frac{J_{l+1/2}[\pi(1+b)\varepsilon^{1/2}]}{N_{l+1/2}[\pi(1+b)\varepsilon^{1/2}]}, \quad (13)$$

где сделаны следующие обозначения:  $b = R_1/L$ ,  $\varepsilon = E/E_1^{(0)}$  и  $E_1^{(0)} = \pi^2 \hbar^2 / 2\mu L^2$ . Трансцендентное уравнение (13) без труда поддается численному решению [26], что позволяет с большой точностью определить значения энергии частицы в слое при различных значениях  $L$  и  $R_1$ . Однако учитывая, что для рассматриваемой системы выполняется условие (2), то для решения уравнения (6) можно применить адекватные условию (2) приближенные методы расчета и для определенного интервала значений отношения  $L/R_1$  получить энергетический спектр  $E$  и радиальные волновые функции  $\Phi(r)$  в аналитическом виде. Перейдем к изложению этих подходов.

### 3. Приближенные решения

#### 3.1. Использование асимптотического поведения

По определению аргумент функции в выражении (10) представляет собой величину

$$x = kr = \pi \sqrt{\frac{E_{\text{rad}}}{E_1^{(0)}}} \frac{r}{L}. \quad (14)$$

Согласно условию (2), отношение  $r/L$  в интервале  $r \in [R_1, R_2]$  всегда много больше единицы:

$$r/L \gg 1, r \in [R_1, R_2]. \quad (15)$$

С другой стороны, отношение  $E_{\text{rad}}/E_1^{(0)} \geq 1$ , так что при выполнении условий (2), (14) и (15) аргумент волновых функций из (10) в интервале  $r \in [R_1, R_2]$  всегда много больше единицы:

$$x = kr \gg 1. \quad (16)$$

Учитывая асимптотическое поведение функций  $J_{l+1/2}(x)$  и  $N_{l+1/2}(x)$  при  $x \gg 1$  [26], для функций  $\chi(x)$  можно записать

$$\begin{aligned} \chi(x)|_{x \gg 1} \cong & \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{x}} \left\{ C_1 \cos \left[ x - \frac{\pi}{2} \left( l + \frac{1}{2} \right) - \frac{\pi}{4} \right] \right. \\ & \left. + C_2 \sin \left[ x - \frac{\pi}{2} \left( l + \frac{1}{2} \right) - \frac{\pi}{4} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (17)$$

Из граничных условий (11), записанных для функции (17), без труда получаем явный вид энергетического спектра (3) частицы в слое при выполнении условий (1) и (2)

$$E = E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2\mu L^2}, \quad (n=1,2,3). \quad (18)$$

Из этих же граничных условий получаем также связь между нормировочными постоянными

$$C_2 = C_1 \tan \left( kR_2 - \frac{\pi l}{2} \right). \quad (19)$$

Проводя нормировку

$$\int_{R_1}^{R_2} |\Phi(r)|^2 r^2 dr = \int_{R_1}^{R_2} |\chi(r)|^2 r dr = 1, \quad (20)$$

для радиальной волновой функции при  $L/R_1 \ll 1$  получаем

$$\Phi(r)|_{L \ll R_1} \cong \Phi_n(r)|_{L \ll R_1} \cong \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{\sin \frac{\pi n}{L} (r - R_1)}{r}. \quad (21)$$

Это приближение с достаточной точностью описывает состояния с малыми значениями орбитального числа  $l \sim 1$ , когда в силу условия (2) центробежной энергией частицы в слое можно пренебречь. Учитывая следующий член асимптотического разложения, для определения энергии получаем следующее трансцендентное уравнение:

$$\tan(\pi\sqrt{\varepsilon}) = \frac{2\pi\sqrt{\varepsilon} l(l+1)}{l^2(l+1)^2 + 4\pi^2\varepsilon\lambda^{-1}(1+\lambda^{-1})}.$$

Соответственно для огибающей радиальной волновой функции получаем

$$\chi_l(kr) \cong \sqrt{\frac{2}{L}} \left\{ \left[ 1 + \frac{l^2(l+1)^2}{4k^2 r R_1} \right] \sin[k(r - R_1)] \right\}, \quad k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}.$$

Эти соотношения позволяют определить зависимость энергии и радиальных волновых функций носителей заряда от орбитального квантового числа  $l$  и геометрических размеров образца.

### 3.2. Приближение сферического ротатора

Суть этого приближения, основанного на выполнении условий (1) и (2), состоит в том, что вследствие «тонкости» слоя в его пределах радиальная переменная и соответственно связанная с ней центробежная энергия изменяются относительно мало. Действительно, в пределах слоя для среднего значения величины  $r^{-2}$  можем написать (с точностью до членов первого порядка по  $L/R_1$ )

$$\bar{r}^{-2} = \frac{1}{2} [R_1^{-2} + R_2^{-2}] \approx \frac{1}{R_1^2} \left( 1 - \frac{L}{R_1} \right). \quad (22)$$

Соответственно в уравнении (6) в выражении для центробежной энергии без нарушения физической общности задачи можно провести замену [27]

$$\frac{1}{r^2} \rightarrow \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \equiv \frac{1}{R_0^2} = \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{R_1^2} + \frac{1}{R_2^2} \right]. \quad (23)$$

Тогда уравнение (6) можно записать в следующем виде:

$$\frac{1}{r^2} \left[ r^2 \frac{d\Phi(r)}{dr} \right] + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - E_{\text{rot}}] \Phi(r) = 0, \quad (24)$$

где введено обозначение  $E_{\text{rot}} = \hbar^2 l(l+1)/2\mu R_0^2$ . Сделаем теперь подстановку

$$\Phi(r) = \frac{\chi(r)}{r}, \quad (25)$$

и, введя обозначение  $E - E_{\text{rot}} = E_{\text{rad}}$ , для энергии и радиальной волновой функции получаем

$$E_{\text{rad}} = E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2\mu L^2}, \quad E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_0^2}, \quad E|_{L \ll R_1} \equiv E_{n,l} \cong E_{\text{rad}} + E_{\text{rot}}, \quad (26)$$

$$\Phi(r)|_{L \ll R_1} \cong \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{\sin \frac{\pi n}{L} (r - R_1)}{r}. \quad (27)$$

### 3.3. Адиабатическое приближение

Опять же в силу условия (2) радиальное движение частицы в пределах слоя можно считать «быстрым» по сравнению с «медленным» ротационным движением по радиусу  $r \gg L$ . Это дает нам возможность для применения адиабатического приближения [28]. Подстановкой радиальной волновой функции (25) в (6) для радиальной части системы получим

$$\frac{d^2 \chi(r)}{dr^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} \chi(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \chi(r) = 0. \quad (28)$$

Для «быстрой» радиальной части имеем уравнение

$$\frac{d^2\chi(r)}{dr^2} + \frac{2\mu E_{\text{rad}}}{\hbar^2} \chi(r) = 0, \quad (29)$$

решениями которого являются

$$E_{\text{rad}} \equiv E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2\mu L^2}, \quad \chi(r) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi n}{L} (r - R_1). \quad (30)$$

Усредняя центробежный потенциал по состояниям (30), получаем

$$\frac{\pi^2}{2\mu} \left\langle \frac{l(l+1)}{r^2} \right\rangle = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_n^2} \cong \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_1^2} \left[ 1 - \frac{L}{R_1} + \frac{L^2}{R_1^2} \left( 1 - \frac{3}{2\pi^2 n^2} \right) \right], \quad (31)$$

$$E_{n,l} = E_1^{(0)} n^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_n^2}.$$

### 3.4. Ротационное движение как возмущение

Обратимся вновь к уравнению (27) и проведем в нем замену переменной

$$\rho = r - R_1, \quad r \in [R_1, R_2], \quad \rho \in [0, L]. \quad (32)$$

В силу условия (2) для переменной  $\rho$  имеет место условие

$$\frac{\rho}{R_1} \ll 1. \quad (33)$$

Воспользовавшись этим условием, проведем в уравнении (27) в выражении центробежной энергии разложение по степеням малого параметра  $\rho/R_1$ . Тогда уравнение (27) принимает следующий вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\chi(\rho)}{d\rho^2} + \left[ \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_1^2} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_1^2} \frac{2\rho}{R_1} \right] \chi(\rho) = E\chi(\rho). \quad (34)$$

В данном случае величину

$$F_l(\rho) = -\frac{\hbar^2 l(l+1)}{\mu R_1^2} \frac{\rho}{R_1} \quad (35)$$

можно представить как возмущение в уравнении (35). Для решений «невозмущенного» уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\chi^{(0)}(\rho)}{d\rho^2} = E'\chi^{(0)}(\rho), \quad E' = E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_1^2} \quad (36)$$

получаем следующие выражения:

$$E' \equiv E_n^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2\mu L^2} = E_1^{(0)} n^2, \quad (37)$$

$$\chi^{(0)}(r) = \chi_n^{(0)}(r) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi n}{L} (r - R_1). \quad (38)$$

Используя теперь стандартную методику расчета теории возмущений [25] и известные формулы суммирования рядов [26], для поправок первого и второго порядков к «невозмущенной» энергии  $E' = E_n$  соответственно получаем

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{F_l L}{2} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_1^2} \frac{L}{R_1}, \quad (39)$$

$$\Delta E_n^{(2)} = \frac{(F_l L)^2}{48 \Delta E_1^{(1)} n^2} \left( 1 - \frac{15}{\pi^2 n^2} \right). \quad (40)$$

Проводя вычисления по той же методике, для возмущенной волновой функции получаем [26]

$$\begin{aligned} \chi(\rho) &= \chi_{n,l}(\rho) \\ &= \sqrt{\frac{2}{L}} \left\{ \sin \frac{\pi n \rho}{L} - \frac{F_l L}{4 E_1^{(0)} n^2} \left[ \frac{\pi n \rho}{L} \left( 1 - \frac{\rho}{L} \right) \cos \frac{\pi n \rho}{L} - \left( \frac{1}{2} - \frac{\rho}{L} \right) \sin \frac{\pi n \rho}{L} \right] \right\} \\ &= \chi_n^{(0)}(\rho) - \frac{\eta_l}{4n^2} f_n(\rho), \quad \eta_l = \frac{F_l L}{E_1^{(0)}}. \end{aligned} \quad (41)$$

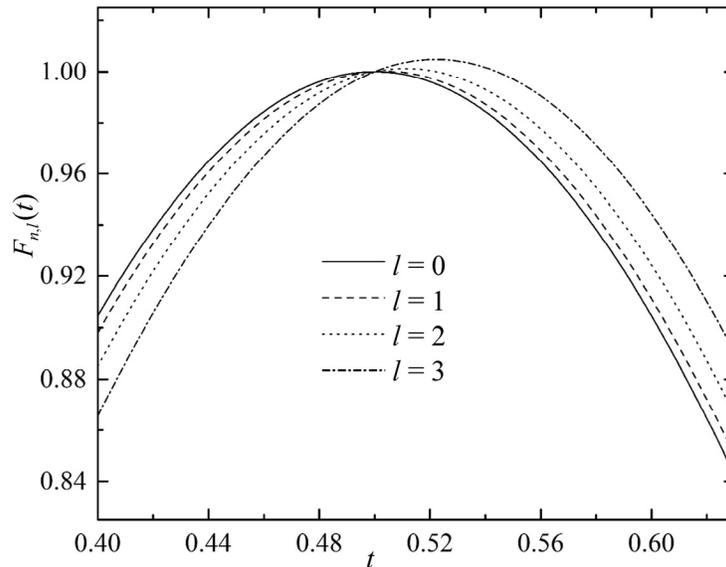


Рис.1. Графики функции  $F_l(t) = L|\chi_{n,l}(t)|^2/2$  для значений  $n = 1$  и  $l = 0,1,2,3$ ;  $t = \rho/l$ .

В этом случае возмущенная радиальная волновая функция становится зависящей от орбитального числа  $l$ . На рис.1 представлены графики функции  $F_{n,l}(\rho) = L|\chi_{n,l}(\rho)|^2/2$  для различных значений орбитального числа  $l$ . С ростом числа  $l$  максимум функции  $F_{n,l}(t)$  смещается в область больших  $t$ , т. е. с увеличением энергии ротационного движения максимум плотности вероятности пространственного распределения носителей смещается в область больших радиусов.

### 3.5. Приближение Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна (ВКБ-метод)

Рассмотрим теперь случай, когда для слоя по-прежнему выполняется условие (1), а вместо условия (2) имеет место более «мягкое» условие

$$L < R_1. \quad (42)$$

Вводя обозначения

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = -\xi^2, \quad g_l(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} = \frac{\beta_l}{r^2}, \quad (43)$$

уравнение (27) запишем в виде

$$\frac{d^2\chi_{n,l}(\rho)}{d\rho^2} - [\xi^2 - g_l(r)]\chi_{n,l}(\rho) = 0. \quad (44)$$

Табл.3. Значения безразмерной энергии  $\varepsilon_{11} = E_{11}/E_1^{(0)}$ , ( $n = 1, l = 1$ ) для различных значений параметра  $\lambda = L/R_1$

$\varepsilon_{11} \backslash \lambda$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5
Точное решение	1.00184	1.00672	1.01388	1.02276	1.03293
Модель ротатора	1.0018529	1.0068742	1.014529	1.024507	1.036625
Адиабат. приближение	1.0018429	1.006766	1.014173	1.023876	1.036105
Теория возмущений	1.0018255	1.006491	1.012789	1.01947	1.02536
ВКБ-метод	1.00184	1.00672	1.01391	1.02276	1.03297
МКР*	1.00184	1.00672	1.01380	1.02268	1.03285
МКЭ**	1.00184	1.00675	1.01376	1.02294	1.03235
Метод Арнольди***	1.00184	1.00677	1.01368	1.02544	1.03296

\*Область  $r \in [R_1, R_2]$  дискретизирована с шагом  $R_2 - R_1/100$ .

\*\*Наибольший размер элемента  $\sim R_2 - R_1/100$ .

\*\*\*Использовано 100 итераций.

Методика решения этого уравнения приведена в работе [28]. В табл.3 и 4 представлены результаты расчета энергии одночастичных состояний в структуре CdS/HgS/CdS приближенными методами, описанными в разделах 3.1–3.5 и численных расчетов, проведенных методом конечных разностей (МКР) [29], методом конечных элементов (МКЭ) [30,31] и итеративным методом Арнольди [32].

Табл.4. Значения безразмерной энергии  $\varepsilon_{21} = E_{21}/E_1^{(0)}$  ( $n = 2, l = 1$ ) для различных значений параметра  $\lambda = L/R_1$

$\varepsilon_{21} \backslash \lambda$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5
Точное решение	4.00184	4.00675	4.01402	4.02306	4.03356
Модель ротатора	4.001853	4.006874	4.014529	4.024507	4.036625
Адиабат. приближение	4.001845	4.006803	4.01436	4.02447	4.03755
Теория возмущений	4.001826	4.006491	4.012789	4.01947	4.02536
ВКБ-метод	4.00184	4.00675	4.01402	4.02306	4.03355
МКР	4.00184	4.00664	4.01413	4.02305	4.03355
МКЭ	4.00184	4.00674	4.01402	4.02309	4.03354
Метод Арнольди	4.0020	4.00723	4.00950	4.01991	4.05054

#### 4. Заключение

Результаты численных расчетов в интервале значений отношения  $L/R_1 = \lambda \in [0; 0.4]$  с достаточной точностью совпадают с результатами, полученными аналитическим путем. Для класса наносферических структур, геометрические размеры и физические параметры которых допускают модельные описания (1)–(3), в указанном интервале значений параметра  $\lambda$  приведенные выше приближенные методы вполне адекватно описывают одночастичные состояния носителей заряда в наносферическом гетерослое и позволяют получить соответствующие аналитические выражения для энергетического спектра и огибающих волновых функций частиц.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **D. Schooss, A. Mews, A. Eychmüller, H. Weller.** Phys. Rev. B, **49**, 17072 (1994).
2. **G.W. Bryant.** Phys. Rev. B, **52**, 16997 (1995).
3. **M. Braun, C. Burda, M.A. El-Sayed.** Phys. Chem. A, **105**, 5548 (2001).
4. **J. Perez-Conde, A.K. Bhattacharjee.** Phys. Stat. Sol. (a), **203**, 1182 (2006).
5. **I.C. Chen, C.L. Weng, Y.C. Tsai.** J. Appl. Phys., **103**, 064310 (2008).
6. **M. Royo, J. Planelles, M. Pi.** Phys. Rev. B, **75**, 033302 (2007).
7. **D.A. Baghdasaryan, D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan.** J. Nanophotonics, **10**, 033508 (2016).
8. **G. Jia.** Optoelect. Adv. Mater, **5**, 738 (2011).
9. **D.W. Kim, K. Cho, H. Kim, B. Park, M.Y. Sung, S. Kim.** Sol. St. Commun, **140**, 215 (2006).
10. **M. Braun, S. Link, C. Burda, M. El-Sayed.** Phys. Rev. B, **66**, 205312 (2002).
11. **L. Cao, S. Huang, S. Lü, J. Lin.** J. Col. Interf. Sci., **284**, 516 (2005).
12. **Sh. Jun-Jie.** Chines Phys., **11**, 1286 (2002).
13. **В.А. Арутюнян, Э.М. Казарян, А.А. Саркисян.** Известия НАН Армении, Физика, **46**, 440 (2011).
14. **Q. Zhong, L. Lai.** J. Semicond., **34**, 122002 (2013).
15. **L.J. Lauhon, M.S. Gudiksen, D. Wang, C.M. Lieber.** Nature, **420**, 57, (2002).
16. **Д.Б. Айрапетян, Э.М. Казарян, О.Х. Тевосян.** Известия НАН Армении, Физика, **49**, 190 (2014).
17. **A. Smith, H. Duan, A. Mohs, S. Nie, S.** Adv. Drug Delivery Rev., **60**, 1226 (2008).
18. Metal Nanoparticles in Microbiology, M. Rai, N. Duran, Eds., Heidelberg-Dordrecht-London-New York, Springer Science & Business Media, 2011.
19. **N. Waiskopf, R. Rany, Sh. Itzhak, Y. Lior, S. Hermona, B. Uri Banin.** BioNanoScience, **3**, 1 (2013).
20. **S. Ogli, A. Rostani.** Nano Biotechnology IET, **7**, 14 (2013).
21. **V.A. Haroutyunian.** Thin Solid Films, **446**, 258 (2004).
22. **V.A. Harutyunyan, K.S. Aramyan, H.S. Petrosyan, G.H. Demirjian.** Physica E, **24**, 173, (2004).
23. **В.А. Арутюнян, К.С. Арамян, Г.Ш. Петросян.** ФТП, **38**, 349 (2004).
24. **В.А. Арутюнян.** ФТТ, **45**, 1280 (2003).
25. **L.D. Landau, E.M. Lifshits.** Course of Theoretical Physics. Quantum Mechanics, Non-Relativistic Theory, vol. 3, Oxford, Pergamon, 1974.
26. **V. Harutyunyan.** Effect of Static Electric Fields on the Electronic and Optical Properties of Layered Semiconductor Nanostructures, chapter 1, Bentham Science, 2015.
27. **Э.М. Казарян, А.А. Костанян, А.А. Саркисян.** Известия НАН Армении Физика, **42**, 218 (2007).
28. **В.А. Арутюнян, С.Л. Арутюнян, Г.О. Демирчян, Н.Г. Гаспарян,** Известия НАН Армении, Физика, **43**, 336 (2008).
29. **А.А. Самарский, Е.С. Николаев.** Методы решения сеточных уравнений. Москва, Наука, 1978.
30. **O.C. Zienkiewicz, R.L. Taylor, O.C. Zienkiewicz, R.L. Taylor, R. L.** The Finite Element Method, vol. 3. London, McGraw-Hill, 1977.
31. **P. Craig.** Phys. Rev. B, **56**, 10404 (1997).
32. **V. Heinrich.** Comp. Phys. Commun., **174**, 441 (2006).

ՄԻԱԷԼԵԿՏՐՈՆԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ ՄԵԾ ՇԱՌԱՎՂՈՎ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ  
ՆԱՆՈԳՆԴԱՅԻՆ ՇԵՐՏՈՒՄ

Վ.Ա. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Դ.Բ. ՀԱՅՐԱՊԵՏՅԱՆ, Դ.Ա. ԲԱԴԴԱՍԱՐՅԱՆ

Դիտարկված են միամասնիկային վիճակները գնդային միջուկ/թաղանթ/թաղանթ նանոշերտում ուժեղ քվանտացման ռեժիմում: Դիտարկումն իրականացված է այնպիսի կառուցվածքների համար, որոնցում բաղադրիչների երկրաչափական չափերի հարաբերություններն ու նրանց նյութերի հատկությունների տարբերությունը բերում է նրան, որ կառուցվածքի միջին շերտը լիցքակիրների համար սկսում է հանդես գալ որպես քվանտային փոս: Առաջարկված են մոտավոր լուծման համարժեք մոտեցումներ, որոնք հնարավորություն են տալիս միամասնիկային մոտավորությամբ վերլուծական տեսքով ստանալ լիցքակիրների էներգիական սպեկտրն ու ալիքային ֆունկցիաները կառուցվածքի քվանտային շերտում: Կատարված է նաև վերլուծական մեթոդներով ստացված արդյունքների համեմատություն թվային եղանակով ստացված արդյունքների հետ: Նշված է քվանտացված շերտի հաստության և նրա շառավղի միջև հարաբերության արժեքների այն տիրույթը, որի դեպքում վերլուծական և թվային հաշվարկների արդյունքները համընկնում են բավարար ճշգրտությամբ:

SINGLE-ELECTRON STATES IN SEMICONDUCTOR NANOSPHERICAL LAYER  
OF LARGE RADIUS

V.A. HARUTYUNYAN, D.B. HAYRAPETYAN, D.A. BAGHDASARYAN

The single-particle states in spherical core/shell/shell nanolayer in strong quantization regime were considered. The ratio between the geometrical dimensions of the corresponding components of the sample was chosen such that the differences between the characteristics of materials form a quantum well for charge carriers in the middle layer. The adequate approximation approaches to analytically determine the energy spectrum and the wave functions of the single-electron states in spherical nanolayer were suggested. A comparison of the results of the analytical and the numerical calculations was performed. The interval of the values of ratio between the layer thickness and its radius at which the results of proposed approximations coincide with the results of numerical calculations with sufficient accuracy was determined.